

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ПОДАННЯ
СИНЕРГЕТИЧНИХ СИСТЕМ

Конспект лекцій
для студентів
механіко—математичного та фізико—технічного напрямків
усіх спеціальностей денної форми навчання

Затверджено на засіданні кафедри як конспект лекцій з дисципліни «Моделювання синергетичних систем».

Протокол № 1 від 28.08.2003

Суми
Видавництво Сумського державного університету
2003

Конспект лекцій на тему «Подання синергетичних систем»
/Укладач Д.О.Харченко. — Суми: Видавництво СумДУ, 2003. — 136с.

Кафедра моделювання складних систем

Зміст

Вступ	5
Розділ 1 Основні поняття та визначення	8
1.1 Ієрархічність, складність та організація	8
1.2 Рівні опису	18
1.3 Підходи до побудови математичних моделей	20
1.4 Рівноважні стани та нерівноважні обмеження	23
Розділ 2 Ентропія як міра самоорганізації	28
2.1 Інформація та ентропія	28
2.1.1 Умова максимуму ентропії	29
2.1.2 Зв'язок інформації й ентропії	32
2.1.3 Зростання ентропії	32
2.1.4 Максимальність ентропії при обмеженнях	34
2.2 Елементи рівноважної термодинаміки	37
2.3 Особливості відкритих систем	39
Розділ 3 Біфуркації та їх аналіз	42
3.1 Загальний підхід	42
3.2 Біфуркації подвоєння	43
3.3 Біфуркація з фокуса в цикл (біфуркація Хопфа)	45
3.3.1 Синхронізація двох осциляторів	47
3.4 Біфуркація з граничного циклу	48
3.4.1 Подвоєння періоду	52
3.4.2 Субгармоніки	53
3.4.3 Біфуркація в тор	54
Розділ 4 Основи теорії катастроф	56
4.1 Зведення до градієнтної форми	56
4.2 Характер потенціальних функцій	57
4.2.1 Збурення	58
4.2.2 Сім'я потенціальних функцій	60
4.2.3 Найпростіші катастрофи	61
4.3 Поняття та принципи теорії фазових переходів	63
4.3.1 Індикатори катастроф	65
4.3.2 Класифікація фазових переходів	67

Розділ 5	Теорія фазових переходів	69
5.1	Модель Гінзбурга—Ландау	69
5.1.1	Перехід другого роду	70
5.1.2	Вплив поля	72
5.1.3	Критична точка рідини	75
5.1.4	Перехід першого роду	78
5.1.5	Потрійна точка рідини	81
5.1.6	Критична поведінка	82
5.2	Зміна інформації при фазовому переході	84
5.3	Спряжені змінні	88
5.3.1	Узагальнюючі положення	90
5.3.2	Принцип Ле—Шательє	91
Розділ 6	Синергетичні переходи	93
6.1	Параметр порядку та принцип підпорядкування	93
6.2	Порогові явища в клітинній динаміці	95
6.3	Синергетична концепція фазового переходу	96
6.3.1	Система Лоренца	97
6.3.2	Переходи другого роду	98
6.3.3	Переходи першого роду	101
Розділ 7	Теорія зародкоутворення	103
7.1	Умови утворення зародків	103
7.2	Флуктуаційне виникнення зародків	105
7.3	Стадія коалесценції	109
7.4	Синергетична картина коалесценції	111
Розділ 8	Просторово розподілені системи	114
8.1	Загальні властивості структур	114
8.2	Аналіз стійкості	115
8.3	Хвилі перемикання	119
8.4	Швидкість переходу із метастабільного стану	122
8.5	Збуджені середовища	124
Розділ 9	Теорія ієрархічного зв'язку	129
9.1	Населеність ієрархічного рівня	129
9.2	Властивість самоподібності ієрархічних систем	130
9.3	Властивості ієрархічного зв'язку	133
Список літератури		135

Вступ

Термін *синергетика* вперше був уведений Германом Хакеном із Штутгартського університету (ФРН) на початку 70-х років ХХ століття. Цей термін походить від грецького слова *συνεργητικός* — спільний, узгоджено діючий, визначає новий напрямок у науці, пов'язаний із вивченням закономірностей просторово-тимчасового упорядкування в найрізноманітніших системах. Синергетика не є новою наукою, а представляє новий об'єднуючий напрямок у науці, мета якого полягає у виявленні загальних ідей, методів, закономірностей переходу матерії від одного рівня організації до іншого, що проявляються у різноманітних областях природознавства.

Будучи одним із творців теорії лазерів, Г.Хакен помітив, що утворення внутрішніх структур у лазері відбувається відповідно до законів, що дуже нагадують конкуренцію молекулярних видів. Аналіз подібних прикладів приводить до висновку, що процеси структуроутворення й самоорганізації в найрізноманітніших системах, що є предметом дослідження у фізиці, хімії, біології, економіці, соціології, відбуваються відповідно до невеликого числа сценаріїв, що не залежать від конкретної системи. Можна сказати, що виникнення синергетики тісно зв'язане, з одного боку, зі створенням у 70-х роках загальної фізичної теорії критичних явищ, а з іншого боку, із принциповим переглядом можливостей динамічного підходу до опису фізичних систем.

Вважається загальноприйнятим поняття про фізику як про науку, що має справу із задачами динаміки, які точно розв'язуються. Успіх ньютонівської механіки в описі і передбачуванні астрономічних явищ свого часу був надзвичайно вражаючим. Тому вважалося досить природним перенесення динамічного підходу на інші розділи фізики, виходячи з добре відомої концепції лапласівського детермінізму, заснованого на тому, що якою б складною не була система, її поведіння можна принципово точно передбачити, знаючи початкові умови й сили, що діють між її складовими частинами. Однак практичне застосування динамічних методів до систем багатьох взаємодіючих частин виявилось зовсім нереальним. Тому фізика пішла по шляху відмовлення від повного детермінованого опису багаточасткових систем і переходу до неповного (частково детермінованого) опису із використанням малого числа параметрів. Проте ідеологія опису завжди була близька до динамічного. Так, наприклад, розділ фізики, що вивчає теплові явища, недарма називається термодинамікою, тому що він також побудований за принципом динаміки, тобто заснований на деякій системі рівнянь, які у принципі розв'язуються й дають цілком визначене значення термодинамічних величин. Статистичну фізику можна розглядати як особливий вид динаміки.

У квантовій фізиці з'являється принципово нове поняття ймовірносного передбачування поведження системи. Але й у квантовій теорії позначається вплив динамічного підходу. Це виявляється хоча б у тому, що цей розділ фізики найчастіше називають квантовою механікою. Після Ейнштейна неодноразово починалися спроби пояснити ймовірнісний характер поведження квантової системи на основі неповноти її опису, тобто припущення про існування прихованих динамічних параметрів, що підпорядковуються більш точній динамічній теорії.

Останніми роками було переконливо показано не тільки те, що в квантовій теорії принципово не може бути прихованих локальних параметрів, але й істотно змінилися погляди на класичну механіку. Виявляється, що велика частина механічних систем є такими, що принципово не інтегруються. Справа у тому, що поведження реальної динамічної системи більше схоже на хаотичне, випадкове. Так, наприклад, дотепер не отримана відповідь на питання про стійкість Сонячної системи, і фахівці схиляються до того, що довгостроковий прогноз її поведження неможливий. Незважаючи на те, що сучасні комп'ютери дозволяють успішно керувати космічними об'єктами, залишається правильним і те, що їх траєкторії на досить великому часовому інтервалі стають непередбаченими. Схожі проблеми виникають і в інших областях. Неможливість адекватного уявлення про характер руху заряджених частинок у системі магнітних дзеркал є головною причиною того, що дотепер не вирішено проблему керованого термоядерного синтезу.

Хаотичне поведження можуть виявляти не тільки консервативні системи, тобто системи, в яких енергія зберігається, але і дисипативні системи. У гамільтонових системах, для яких справедлива теорема Ліувіля про сталість фазового об'єму, хаотичність поведження виявляється в тому, що початковий стан ансамблю систем, що безупинно заповнює деяку локально обмежену область фазового простору, з часом складним способом деформується, проростаючи й заповнюючи весь фазовий простір. Фазовий об'єм при цьому зберігається, згодом вихідна компактна область початкових станів ансамблю перетворюється в пухкий заплутаний клубок безлічі ниток — фазових траєкторій окремих систем ансамблю. При цьому близькі початкові стани експоненціально швидко розходяться одна від іншої із часом.

У дисипативних системах фазовий об'єм із часом скорочується, і у найпростішому випадку система досягає стану рівноваги, а фазова траєкторія має вигляд стійкого фокуса. Якщо дисипативна система є відкритою і ззовні до неї надходить енергія, то фазовий портрет системи може мати вигляд граничного циклу (система випробує коливання), а може перейти в режим складного руху, що називається дивним атрактором. У такий спосіб фазові траєкторії дисипативних систем відповідають атракторам — рівновазі, періодичним коли-

ванням або дивному атрактору. У відкритих дисипативних системах з багатьма атракторами може розвиватися процес упорядкування або самоорганізації, що означає появу порядку у системі, для якої вихідний стан був однорідним.

При розгляді процесів просторово—часового упорядкування відкритих дисипативних систем, що перебувають в сильно нерівноважному стані, Пригожиним було уведено термін *дисипативні структури*. Подальший розвиток теорії дисипативних структур і нерівноважних фазових переходів дозволив не тільки простежити глибоку аналогію з теорією рівноважних фазових переходів, але і дати більш узагальнене тлумачення зміни характеру поведінки системи.

Мета даного курсу лекцій — розглянути з єдиної точки зору процеси переходу від неупорядкованого стану до упорядкованого у різних системах. В основному нашу увагу буде звернено на системи, що вивчає термодинаміка і статистична фізика. Одним з прикладів зміни порядку у фізичних системах є біфуркації та фазові переходи, і тому в першу чергу ми звернемося до проблеми опису біфуркацій та рівноважних фазових переходів. Потім перейдемо до розгляду синергетичних систем та методів синергетики при описі ефектів самоорганізації.

Розділ I

Основні поняття та визначення

1.1 Ієрархічність, складність та організація [1]–[5]

Синергетичні системи по своїй суті є ієрархічними. Під *ієрархічною системою* розуміють ансамбль взаємодіючих частин, що складається з послідовності вкладених одна в одну взаємодіючих субодиноць. Кожна кількість взаємодіючих компонентів, що складають ієрархічний рівень, дозволяє свій характерний опис на мові простору станів із змінними та параметрами, які належать кожному конкретному рівню. Взаємодіючі змінні (параметри) на вищому ієрархічному рівні є «колективними властивостями» (статистичними моментами) динаміки, що відбувається на нижньому рівні. Тому перехід на вищий рівень ієрархії супроводжується значним зменшенням числа ступенів вільності. Вищий рівень одержує селективну інформацію з нижчого рівня і, у свою чергу, керує динамікою нижнього рівня.

Складність системи обумовлена числом її компонентів та способом їхньої взаємодії. Така складність стосується апаратної реалізації системи. При різних умовах, в яких перебуває система, вона може проявляти просту поведінку (газ, рідина) та складну (сніжинка, структура тощо), тому доцільніше характеризувати не складність системи, а складність її поведінки. Система може бути складною на структурному або функціональному рівні. *Структурна складність* зростає при збільшенні числа взаємодіючих одиниць, відсотка взаємозв'язку між ними і т.ін. На *функціональному рівні* складність зростає при збільшенні мінімальної довжини (найстисненого) алгоритму, користуючись яким, можна повністю відбудувати поведінку системи.

Пристрій, що здатний пізнавати — стискати та моделювати деяке явище, має високий ступінь самоорганізації. Під *самоорганізацією* розуміють спонтанне виникнення дальньої просторової або часової когерентності серед змінних системи. Система стає когнітивною (здатною до пізнання) при досяганні мінімального числа (двох) ієрархічних рівнів (взаємно однозначні відображення не породжують когнітивної здатності). Умовою когнітивності є здатність системи, що самоорганізується, до реплікації іншої системи або своїх частин. У свою чергу, така особливість до самореплікації є ознакою того, що система знає, яким чином слід стискати інформацію та моделювати. Когнітивна активність є ефективною при стисканні складностей іншої системи (або своїх підсистем) завдяки створенню колективних властивостей, в результаті яких відбувається зменшення числа ступенів вільності. Простим прикладом реплі-

кації є самовідбудова структури річної гідри, якщо її розрізати пополам (кожна половинка відтворює відсутню частину).

Наведемо декілька прикладів, що ілюструють процеси складної поведінки з просторовим або часовим упорядкуванням, а саме *бістабільні* системи, які характеризуються двома стійкими станами, що виникають за певних умов.

Газ Ван-дер-Ваальса. Рівняння стану для N молекул газу, що займають об'єм V при температурі T має вигляд

$$P = \frac{NT}{V - Nb} - \frac{N^2a}{V^2}, \quad (1.1)$$

де P — тиск; a і b — константи Ван-дер-Ваальса, що характеризують відповідно міжмолекулярне притягування і відштовхування. Розглянемо залежність питомого об'єму від тиску при $T = \text{const}$

$$\frac{V}{N} = f(P, T), \quad (1.2)$$

яку принципово можна одержати з рівняння

$$3pv^3 - (p + 8\tau)v^2 + 9v - 3 = 0, \quad (1.3)$$

записаного в безрозмірних змінних $p = P/P_c$, $v = V/NV_c$, $\tau = T/T_c$. На

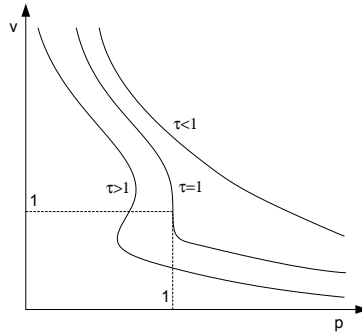


Рисунок 1.1 — Характерний вигляд залежностей $v = f(p, \tau)$

рис.1.1 показано вигляд залежностей $v = f(p, \tau)$. При $\tau > 1$ графік функції $f(p, \tau)$ має S-подібний вигляд, у точках p_1 і p_2 похідна $(\partial v / \partial p)_\tau$ стає нескінченною, що, зокрема, визначає сингулярне поведіння ізотермічної стискальності $k_\tau = -v^{-1}(\partial v / \partial p)_\tau$. Така особливість відома як *гістерезис*. За таких

умов система фактично може перебувати у трьох станах. При цьому один (наприклад, нижня гілка S -подібної залежності) є найстабільнішим, другий (ділянка між верхньою та нижньою гілками) — нестійким, а третій — метастабільним.

Феромагнетик у магнітному полі. На рис.1.2 показано вигляд функції стану магнетика, що зв'язує намагніченість M із магнітним полем H і температурою T . З теорії Кюрі-Вейсса залежність намагніченості від H і T дається таким нелінійним рівнянням

$$\frac{M}{M_0} = \text{th} \left[\frac{\mu H}{2T} + \frac{M/M_0}{T/T_c} \right]. \quad (1.4)$$

Бачимо, що при характерному значенні температури характеристики системи

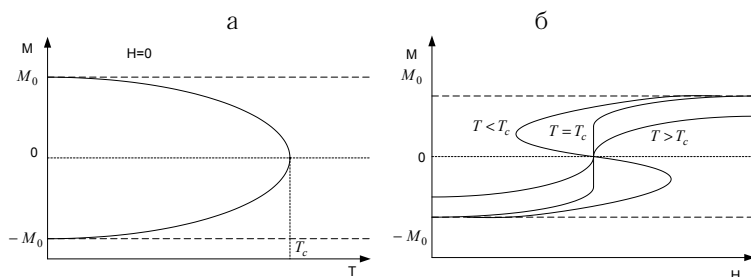
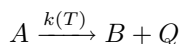


Рисунок 1.2 — Характерний вигляд залежності намагніченості від температури (а) та зовнішнього поля (б)

якісно змінюються, і вона може перебувати одразу у двох стабільних станах при одному значенні параметра H .

Процес горіння. Припустимо, що в деякій системі (реакційному об'ємі) може відбуватися екзотермічна хімічна реакція



при постійній концентрації речовини A , що підтримується за рахунок безперервного припливу від зовнішнього джерела; $k(T)$ — стала швидкості реакції.

Швидкість виділення тепла залежить від температури (рис.1.3), і в разі ізо-

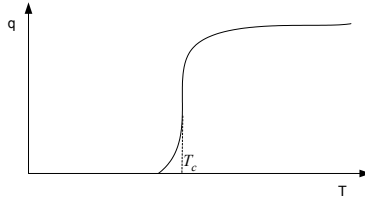


Рисунок 1.3 — Залежність кількості тепла q , що виділяється за одиницю часу, від температури

ляції елемента горіння від середовища тепло, що виділяється в результаті реакції, витрачається на нагрівання системи, тобто

$$q(T)\Delta t = C\Delta T,$$

де ΔT — приріст температури за час Δt ; C — теплоємність елемента. Зміна температури з часом описується рівнянням

$$\dot{T} = C^{-1}q(T). \quad (1.5)$$

За цим рівнянням температура елемента має нескінченно зростати, що неможливо з фізичної точки зору. Слід врахувати, що має місце теплообмін між системою і навколишнім середовищем. Тоді зміна температури елемента буде визначатися таким рівнянням:

$$\dot{T} = C^{-1}q(T) - \gamma(T - T_0) \equiv f(T), \quad (1.6)$$

де γ — коефіцієнт теплопровідності; T_0 — температура середовища. Залежно від значення параметрів можливі три різних ситуації (рис.1.4): а) бістабільний режим — система знаходиться або при температурі T_0 (горіння відсутнє), або при температурі T_f — стаціонарне горіння, при якому все тепло, що виділяється, відводиться у середовище; б) запалення неможливе, єдиний стаціонарний стан $T = T_0$; в) самозапалювання при $T_f > T_c$.

Зауважимо, що коли взяти ланцюжок із пов'язаних між собою подібних елементів, то в наближенні неперервного середовища зміна температури буде описуватися рівнянням

$$\partial T / \partial t = f(T) + \chi \partial^2 T / \partial x^2, \quad (1.7)$$

де χ — температуропровідність.

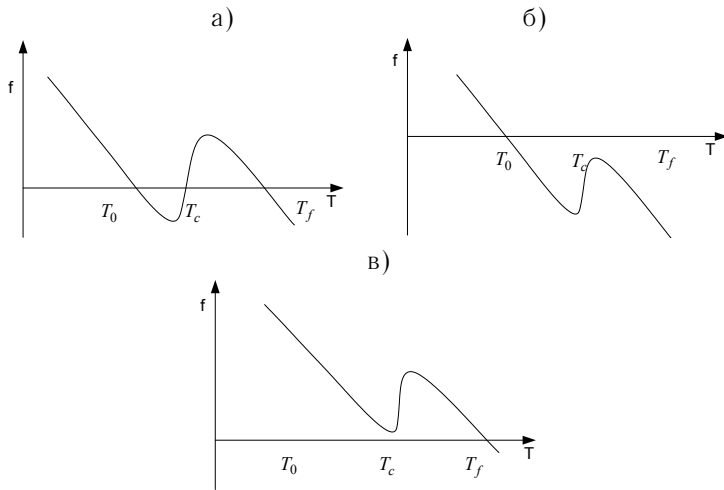


Рисунок 1.4 — Три можливі ситуації поведінки системи при різному співвідношенні параметрів системи: а) бістабільність системи; б) відсутність горіння; в) режим самоzapалювання

Теплова конвекція. У природі тепла конвекція спостерігається при циркуляції атмосфери, океанів, яка відображається на зміні погоди, дрейф материків під дією потоків мантиї та активності Сонця — перенесення тепла та речовини. Простим прикладом конвекції є рух рідини в лабораторних умовах.

Нехай рідина знаходиться між двома площинами, розміри яких перевищують товщину рідини. У стані рівноваги рідина переходить до однорідного стану. Усі об'єми, які можна виділити в рідині, є еквівалентними. Для визначення станів усіх таких об'ємів достатньо знати стан в одному з них. Однорідність розповсюджується на температуру, яка дорівнює температурі середовища. Якщо T_1, T_2 — температури площин, то в стані рівноваги маємо

$$\Delta T = T_2 - T_1 = 0. \quad (1.8)$$

При *збуренні* (підвищенні температури однієї з площин), яке є незначним, до температури площини, змін у стані рідини не відбувається — стан системи *асимптотично стійкий*. Така ситуація характеризує поведінку системи як *просту*. При підігріванні системи знизу умова (1.8) порушується ($\Delta T > 0$) — на систему накладено *зовнішнє обмеження*.

При $\Delta T \ll 1$ у системі відбувається процес перенесення тепла. При цьому

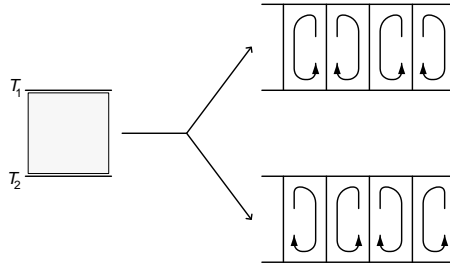


Рисунок 1.5 — Множина розв'язків вище порога нестійкості теплової конвекції

густина, температура та тиск не будуть однорідними, а будуть лінійно змінюватися від теплої площини до холодної. Система переходить у стан *теплопровідності*. Поведінка системи буде такою простою, як і за відсутності зовнішнього обмеження.

При $\Delta T = \Delta T_c$, де ΔT_c — *критична* зміна температури, об'єм речовини починає рухатися. Рух не є випадковим, а створює структури — комірки Бенара з протилежним направленням частинок у кожній з них. Рідина розширюється внаслідок теплового розширення. Це приводить до градієнта густини, що протилежно направлена силі тяжіння. Така конфігурація є потенційно нестійкою. Нехай елементарний об'єм біля нижньої площини зрушено вверх завдяки збуренню. Знаходячись у більш щільній (холодній) області елементарний об'єм підсилює рух наверх завдяки архімедовій силі. Аналогічно зрушений униз об'єм посилює рух до менш щільної області. Таким чином утворюються потоки рідини. При малих відхиленнях температури такий рух компенсується в'язкістю рідини (стабілізуючий фактор). Такі комірки розміщуються вздовж горизонтальної осі, причому рідина в сусідніх комірках рухається у протилежних напрямках. Таким чином, у системі відбулась структуризація — *порушення симетрії*. *Упорядкованість* та *узгодженість* характеризують перехід системи від простого до складного.

При $\Delta T < \Delta T_c$ властивості об'єму V_c , який розташовано між V_a та V_b , ніяким чином не змінюються при заміні V_a та V_b місцями. При $\Delta T > \Delta T_c$ кожен елемент об'єму «стежить» за поведінкою сусідніх елементів і підстроюється під їхню поведінку. Така картина припускає наявність *кореляцій* — статистичного відтворення співвідношень між віддаленими частинами системи.

Експеримент із комірками Бенара характеризується ідеальною відтвореністю. При $\Delta T > \Delta T_c$ і аналогічних початкових умовах створюються комірки з право- та лівостороннім рухом у кожній з них. Якщо встановився потік рідини в

такій комірці, то його направлення більше не змінюється. Однак при повторенні експерименту не відомо, яким буде рух (право- чи лівостороннім) у виділеній комірці (див. рис. 1.5). Направлення є рівноправними і некерованими, неупередженими. Лише завдяки випадковому збуренню формується направлення в комірках. Таким чином, удаліні від стану рівноваги (суттєвому обмеженні ступенів вільності) система пристосовується до середовища декількома різними способами, тобто при *одних і тих значеннях параметрів* стає можливим *декілька різних розв'язків*. Лише випадок вирішує, який з розв'язків реалізується.

При перевищенні наступного критичного значення ΔT^c структура течії стає розмитою і система переходить у режим, що характеризується невпорядкованою поведінкою (залежністю змінних від часу) — *турбуленцією*. Турбуленція є одним із сценаріїв переходу до *хаотичного* режиму.

Таким чином, нерівноважність дозволила перейти від теплової розупорядкованості завдяки трансформації енергії від зовнішнього середовища до упорядкованого стану нового типу — *дисипативної структури*. Остання характеризується порушенням симетрії, множиною виборів та кореляціями в макроскопічних масштабах.

Динаміка Ферхюльста (модель росту популяції). Розглянемо динаміку зміни чисельності популяції, виходячи з таких припущень. Нехай x_0 — початкове значення чисельності популяції, а x_n — чисельність популяції через n років. Тоді відносний приріст популяції буде

$$R = \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n}. \quad (1.9)$$

Якщо $R = \text{const}$, то

$$x_{n+1} = f(x_n) = (1 + R)x_n = (1 + R)^n x_0. \quad (1.10)$$

Нехай оптимальне значення чисельності популяції, що відповідає її рівновазі з середовищем $x_{eq} = 1$. Припустимо, що відносний приріст популяції залежить від її чисельності в такий спосіб:

$$R_n = r(1 - x_n), \quad (1.11)$$

де r — параметр зростання. Тоді для чисельності популяції у $n + 1$ рік маємо

$$x_{n+1} = f(x_n) = r(1 - x_n)x_n + x_n = (1 + r)x_n - rx_n^2. \quad (1.12)$$

Якщо початкове значення $x_0 = 0$ або $x_0 = 1$, то чисельність популяції згодом не змінюється, тобто $x_0 = 0$ і $x_0 = 1$ є стаціонарними значеннями, причому $x_0 = 0$ є нестійким станом, якщо $r > 0$. Розглянемо стійкість стану $x_0 = 1$. Нехай $x_n = 1 - \varepsilon_n$, де ε_n — мале відхилення від стану рівноваги. Тоді

$$x_{n+1} = (1 - r)(1 - \varepsilon_n) - r(1 - \varepsilon_n)^2 \simeq 1 - (1 - r)\varepsilon_n. \quad (1.13)$$

Тобто $\varepsilon_{n+1} \simeq (1 - r)\varepsilon_n$ і $x_{n+1} = 1 - \varepsilon_{n+1}$. Якщо $r < 2$, то $|\varepsilon_{n+1}| < |\varepsilon_n|$, і стан

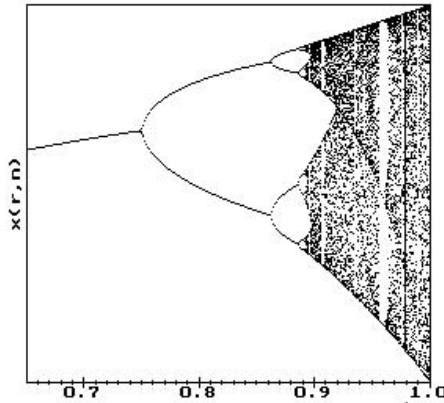


Рисунок 1.6 — Величина стаціонарного значення популяції залежно від параметра приросту r

системи є стійким. При $2 < r < \sqrt{6} = 2.449$ відбуваються осциляції між двома станами (рис.1.6). При $\sqrt{6} < r < 2.570$ динамічне поведіння системи являє собою періодичне чергування чотирьох різних значень чисельності популяцій, а при $r > 2.570$ поведіння системи стає хаотичним.

Складність поведінки біологічних систем. Життєва діяльність амеби *Dictyostelium discoideum* супроводжується проміжним виникненням складності при еволюції від окремих спор в амеби, потім в агрегаційне створіння, далі в плазмодій, потім у багатоклітинне тіло, яке розсіює спори (рис.1.7). Знаходячись в одноклітинній стадії, амеби вживають бактерії і розмножуються діленням. Густина клітин у колонії однакова за простором. Якщо амеби голодують (зміна умов життя або штучне втручання), то вони не помирають, а переходять у стадію агрегації до певного центра, де підвищена концентрація циклічного аденозинмонофосфату. Клітини, рухаючись до центра, підсилюють кількість цієї

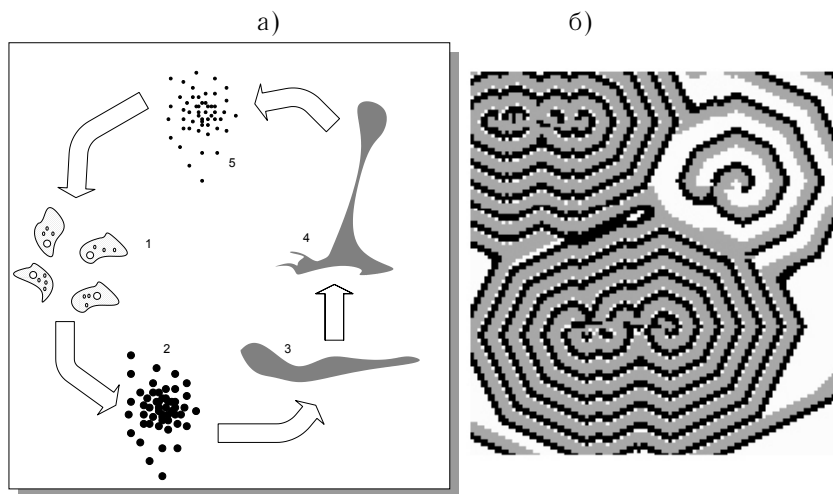


Рисунок 1.7 — Життєвий цикл амеби *Dictyostelium discoideum*: а) 1 — окремі амеби; 2 — стадія агрегації; 3 — плазмодій; 4 — багатоклітинне тіло (грибок); 5 — спори; б) типова картина розповсюдження циклічного аденозинмонофосфату (комп'ютерний експеримент).

речовини, виділяючи її самостійно, що дозволяє передавати його середовищу, контролювати всю територію і формувати багатоклітинне тіло. Відбувається просторова структуризація. Тіло, що виникло, є здатним рухатися для пошуку найсприятливіших умов життєдіяльності (температура, вологість). Після міграції клітини диференціюються, результатом є утворення клітин двох типів: клітини першого типу утворюють ніжку, а клітини другого типу — плодове тіло, усередині якого формуються спори. Спори розсіюються в середовищі життєдіяльності, потім вони проростають і утворюють амеби.

Самоорганізація дефектної структури. При пластичній деформації матеріалів спостерігається декілька режимів поведінки дефектної структури. При слабких деформаціях дефекти (вакансії, дислокації) поводяться автономно і підпорядковуються дії зовнішнього навантаження. При підсиленні зовнішнього впливу (тиску або деформації) густина дислокацій та вакансій стає великою, і вони поводяться когерентно. Перехід із автономного режиму до когерентного проявляє складну поведінку і супроводжується формуванням різного типу дефектних структур. При цьому хаотична структура змінюється на слабкороз-

орієнтовану комірчасту, яка зі збільшенням деформації переходить у комірчасту з чіткими границями, а потім у смугасту. Останні дві спостерігаються незброєним оком (рис.1.8). У процесі пластичної деформації спостерігається

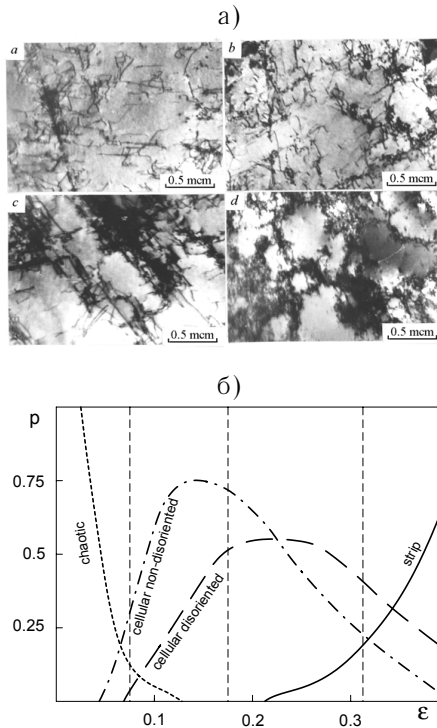


Рисунок 1.8 — Самоорганізація дефектної структури: а) дислокаційна структура упорядкованого сплаву Ni_3Fe при різних деформаціях $\epsilon = 0.05, 0.05, 0.16, 0.28$; б) частка дислокацій нової фази при деформації

сильний зв'язок між різними типами дефектів. Тому моделі опису поведінки дефектної структури задаються якнайменш двома, а то й трьома параметрами, наприклад: деформацією ϵ та напругою σ або густиною лінійних дефектів (дислокацій) d , точкових дефектів (атомних дефектів, вакансій) c та деформацією.

Модель, що відповідає першому вибору параметрів, може мати такий вигляд:

$$\begin{aligned}\dot{\epsilon} &= -\frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\sigma}{\eta}, \\ \dot{\sigma} &= \frac{\sigma_e - \sigma}{\tau_\sigma} - g\sigma\epsilon.\end{aligned}\tag{1.14}$$

Перше рівняння є рівнянням Максвелла для в'язкопружного середовища з часом релаксації $\tau = \eta/\mu$ (η — в'язкість зсуву, μ — модуль зсуву). Друге рівняння описує релаксацію напруги до значення, що визначається зовнішньою напругою σ_e із часом релаксації τ_σ , другий член визначає нелінійні ефекти негативного зворотного зв'язку.

Другий вибір параметрів може задавати еволюцію відносної густини дислокацій $x = d - d_0$, густини точкових дефектів c та поле деформації ϵ із відповідними часами релаксації t_x, t_c, t_ϵ у вигляді

$$\begin{aligned}t_x \dot{x} &= -x + \alpha c, \\ t_c \dot{c} &= -c + \beta x, \\ t_\epsilon \dot{\epsilon} &= \epsilon_0 - \epsilon + \kappa c x.\end{aligned}\tag{1.15}$$

Зв'язок між дефектами задається сталими α, β ; дефекти мають вплив на деформацію, прискорюючи її швидкість з інтенсивністю κ .

1.2 Рівні опису

При описі системи слід вибрати змінні або величини, за допомогою яких цей опис стає можливим. Його можна виконати на різних рівнях, які взаємозв'язані. Наприклад, рідина на мікроскопічному масштабі описується як така, що складається з багатьох окремих молекул. Тому для повного опису слід вибрати радіуси—вектори положень молекул. Однак у багатьох випадках достатньо розглянути рідину на мезоскопічному рівні. Тоді зосереджуються на об'ємах, малих відносно об'єму рідини, але достатньо великих, щоб можна було оперувати такою величиною, як густина, поля швидкостей або локальних температур. На макроскопічному рівні досліджуються структури, наприклад, створення шестикутних комірок Бенара. Аналогічно перехід можна провести на біологічних системах, де мікро-, мезо- та макроскопічному рівням відповідають біомолекулярна поведінка, поведінка клітин, функціонування органів.

Ієрархічні системи мають унікальну особливість *повної розкладеності*. Це означає, що при дослідженні системи на певному ієрархічному рівні можна майже повністю нехтувати тим, що відбувається на верхніх та нижніх рівнях.

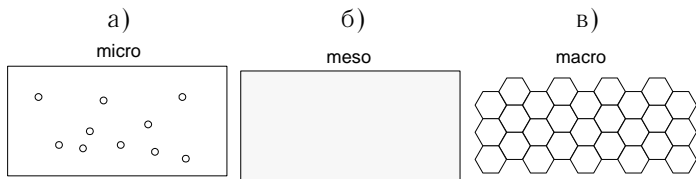


Рисунок 1.9 — Рівні опису: а) мікроскопічний; б) мезоскопічний; в) макроскопічний

Припустимо, що існують такі рівні опису системи: 1) рівень субатомних частинок (ядерна взаємодія W_1); 2) атомний рівень (сильна електромагнітна взаємодія W_2); 3) молекулярний рівень (взаємодія Ван-дер-Ваальса W_3). Відомо є ієрархія інтенсивностей взаємодій: $W_2 \sim 10^{-3}W_1$, $W_2/W_3 \sim R^{-2}/R^{-7}$ або $W_3 \sim W_2R^{-5}$, R — довжина між взаємодіючими частинами. Для характерних часів релаксації відоме співвідношення $\tau_i \sim W_i^{-1}$. Тому динамічні процеси на рівні 1 відбуваються в 10^6 раз швидше, ніж процес на рівні 2, процеси на рівні 2 — швидше в декілька разів, ніж на рівні 3.

Тому при дослідженні системи на рівні 2 слід знати як саме поводить ся матерія на рівнях 1 та 3, оскільки зручно прийняти процеси на рівні 1 у вигляді зовнішніх обмежень, а вплив рівня 3 можна вважати сталим. Ця властивість розкладення у більш складних випадках дозволяє шукати або встановлювати ієрархію в складних системах, надаючи їм більшої автономності та стійкості.

Таблиця 1.1 — Приклади мезоскопічних змінних

Область дослідження	Змінні
Хімічні реакції	Густини молекул у різних фазах
Рідини	Поля швидкостей
Фізика твердого тіла	Густина електронів та дірок
Морфогенез	Кількість клітин у тканинах
Популяційна динаміка	Кількість особнів
Нейронні сітки	Швидкість збудження нейронів
Економіка	Грошові потоки
Соціологія	Кількість осіб, що поділяють певні погляди

1.3 Підходи до побудови математичних моделей [5, 3]

У всіх системах, які здатні до самоорганізації, вирішальна роль за динамікою. Яким чином та які макроскопічні стани створюються, визначається швидкістю зростання *колективних мод* — змінних, що описують стани системи. Завдяки цьому ми приходимо до дарвінізму, що розповсюджується на неживу природу. Вирішальну роль при створенні структур та проявленні колективної поведінки відіграє час. Тому далі розглядається еволюція системи, а рівняння динаміки стають «еволюційними».

Розглянемо узагальнену змінну $x(t)$. Швидкість її зміни з часом подається як $dx/dt = \dot{x}$. Нехай x — кількість клітин у тканині. У багатьох випадках \dot{x} залежить від кількості клітин у поточний момент. Тоді рівняння еволюції кількості клітин набуває вигляду

$$\dot{x} = \alpha x. \quad (1.16)$$

Це рівняння в хімії задає автокаталітичне збільшення речовини з концентрацією x . Широкий клас систем зводиться до розглядання осциляторів із рівнянням

$$\ddot{x} = -\omega^2 x, \quad (1.17)$$

де ω — частота коливань. Це рівняння подається двома рівняннями для двох змінних

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2, \\ \dot{x}_2 &= -\omega^2 x_1 \end{aligned} \quad (1.18)$$

або одним рівнянням першого порядку

$$\dot{x} = i\omega x. \quad (1.19)$$

Нелінійність. Для *синергетичних* систем рівняння суто *нелінійні*. Нехай речовина 1 із концентрацією x_1 створюється автокаталітично при з'єднанні з речовиною 2, що має концентрацію x_2 . Рівняння концентрації речовини 1 має вигляд

$$\dot{x}_1 = \beta x_1 x_2. \quad (1.20)$$

Зрозуміло, що синергетика (взаємодія) частин описується нелінійним членом. У загальному випадку розглядається набір змінних $\{x_i\}$ із нелійними функціями $f(\{x_i\})$ у правій частині.

Керуючі параметри. Особливість синергетичних систем полягає в тому, що ними можна керувати, змінюючи зовнішні фактори, що діють на них. В синергетиці розглядаються відкриті системи, де потік енергії, речовини, інформації відводить систему далеко від стану термодинамічної рівноваги. У випадках, коли зовнішні фактори підтримуються сталими в часі, вони враховуються як керуючі параметри у рівняннях еволюції. Наприклад, у рівнянні (1.16) α є керуючим параметром, який можна визначити як різницю між швидкостями зростання p та розпаду d , тобто $\alpha = p - d$. Керуючі параметри можуть входити у рівняння еволюції різними способами, наприклад, у рівнянні

$$\dot{x}_2 = \alpha x_2 - \beta x_1 x_2 \quad (1.21)$$

стала β описує зв'язок між системами з x_1 та x_2 . Якщо зв'язком керувати ззовні, то β відіграє роль керуючого параметра.

Дисипація. Синергетичні системи є дисипативними, такими, в яких енергія втрачається на перебудову, що приводить до самоорганізації. На механістичному рівні це відображається наявністю тертя. Такі системи характеризуються необерненими процесами. Дисипативні системи відрізняються від консервативних, в яких енергія системи зберігається. Необерненість рівнянь еволюції відносно заміни знака часової змінної означає, що чергування відповідних подій буде необерненим.

Розглянемо реакцію, яка проходить зі швидкістю k :



де A, B — реагенти; C, D — продукти реакції. Швидкість витрати частинок типу A задається частотою зустрічі молекул типу A та B . Таким чином, маємо

$$\dot{x}_A = -k x_A x_B. \quad (1.23)$$

Очевидно, що при заміні $t \rightarrow -t'$ одержуємо

$$\dot{x}'_A = k x'_A x'_B. \quad (1.24)$$

Тепер маємо не витрати речовини, а її продукцію. Тому ці два процеси не еквівалентні один одному.

У випадку реакції



яка проходить із швидкістю k у прямому напрямку, а k' у протилежному, ми спостерігаємо відкриту систему, в якій відбувається обмін масами. Комбінуючи відповідним чином швидкості потоків, приходимо до стану зі сталими концентраціями. Математично це описується нульовою зміною концентрацій речовин:

$$\dot{x}_A = \dot{x}_B = \dots = 0. \quad (1.26)$$

У такому випадку стан системи характеризується як *стаціонарний і нерівноважний*.

Дифузія. Необерненими процесами є процеси типу дифузії та теплопровідності. Як з'ясовано на експерименті, якщо в однорідній рідині виникає просторова неоднорідність (збурення), то вона розпливається з часом та зникає. Аналогічним чином відбувається затухання збурення температури. Кількісний опис цих явищ досягається у рамках рівнянь Фіка та Фур'є відповідно:

$$\dot{c} = D\nabla^2 c, \quad D > 0, \quad (1.27)$$

$$\dot{T} = \chi\nabla^2 T, \quad \chi > 0, \quad (1.28)$$

де c — концентрація деякої речовини; T — температура; D — коефіцієнт дифузії; χ — коефіцієнт теплопровідності. Якщо тепер замінити знак часу, то рівняння

$$\dot{c}' = -D\nabla^2 c', \quad D > 0, \quad (1.29)$$

$$\dot{T}' = -\chi\nabla^2 T', \quad \chi > 0 \quad (1.30)$$

будуть описувати не затухання збурення, а його зростання.

Стохастичність. До відмінних особливостей синергетичних систем відносять стохастичність. Часова еволюція синергетичних систем залежить від причин, які неможливо передбачити з абсолютною точністю. Ці причини вводяться в рівняння еволюції у вигляді *флуктуаційних сил* $\xi(t)$, які у найпростішому випадку створюють рівняння

$$\dot{x} = \alpha x + \xi(t). \quad (1.31)$$

У деяких випадках наявність флуктуацій приводить до якісної зміни в поведінці системи: перехід на новий рівень ієрархії, виникнення просторової структури, резонансу слабкого сигналу.

Загальний вигляд еволюційного рівняння. Оскільки синергетичні системи складаються з великої кількості взаємодіючих частин, кожна з яких описується своєю змінною, то доцільно ввести вектор таких змінних:

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Фізичне значення його компонентів установлюється залежно від рівня, на якому проводиться опис системи. У загальному випадку компоненти можуть залежати від просторової координати \mathbf{r} та часу t . Прикладом може бути густина частинок $x(\mathbf{r}, t)$ в окремій фазі рідини. Тоді маємо

$$\mathbf{x}(\mathbf{r}, t) = (x_1(\mathbf{r}, t), x_2(\mathbf{r}, t), \dots, x_n(\mathbf{r}, t)).$$

Кожна змінна системи визначається своїм еволюційним рівнянням. Тому для всієї системи можна ввести вектор сил \mathbf{f} , що має керуючі параметри, змінні системи, просторову координату та час. Тоді приходимо до загального вигляду еволюційного рівняння синергетичної системи

$$\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{x}, \nabla, \mathbf{r}, t). \quad (1.32)$$

Змінні, що входять до такого рівняння можуть поділятися на парні та непарні відносно оберненості знака часової змінної. Парними є змінні, знак яких не змінюється при $t \rightarrow -t'$. До цього класу відносять температуру, концентрацію. Прикладом непарних змінних є швидкість, імпульс та інші змінні, що створюються як похідні за часом і змінюють знак при заміні $t \rightarrow -t'$.

1.4 Рівноважні стани та нерівноважні обмеження [4, 5]

У механічній рівновазі швидкості та прискорення всіх матеріальних точок дорівнюють нулю. За визначенням результуюча сила, що діє на кожну точку в будь-який момент часу, дорівнює нулю. Порушення цього балансу призводить до порушення рівноваги. У багатьох механічних системах рівновага взагалі не досягається (рух Землі навколо Сонця).

У стані *термодинамічної* рівноваги, протилежно механічній рівновазі, молекули перебувають у постійному русі і зазнають дії незбалансованих сил у разі, коли температура недостатньо низька. Тому термін *рівновага* відносять до колективних властивостей такої системи в цілому, наприклад, температури, густини, тиску.

Припустимо, що система знаходиться в середовищі, і між ними відбуваються обмінні взаємодії. Нехай $\mathbf{x} = (c, T, p, \dots)$ — вектор характеристик системи, $\mathbf{x}_e = (c_e, T_e, p_e, \dots)$ — вектор характеристик середовища. Вважається,

що система перебуває в стані термодинамічної рівноваги, коли характеристики, що відповідають за обміни між системою та середовищем, мають однакові значення як для системи, так і для середовища. Це відповідає:

- еквівалентності температур ($T = T_e$);
- еквівалентності тиску ($p = p_e$);
- еквівалентності змінних складу системи ($c_i = c_{ie}$), енергії, що припадає на одну частинку (хімічних потенціалів, $\mu_i = \mu_{ie}$).

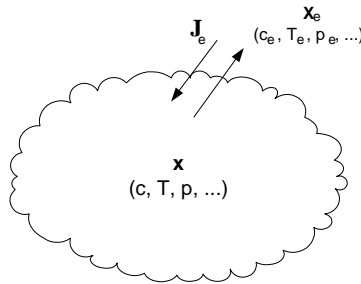


Рисунок 1.10 — Схематичне зображення відкритої системи

В ізольованих системах обміну енергією, масою, інформацією не існує. Неможливо зробити висновок, що в рівноважному стані ізольована система перебуває у тому самому стані, що і середовище.

У відповідності до наведених визначень рівновага автоматично є стаціонарним станом $\dot{\mathbf{x}} = 0$. Але цей стаціонарний стан є особливим, оскільки завдяки тотожності за характеристиками системі нічим обмінюватися із середовищем. Відсутність обміну характеризується нульовими потоками в системі

$$\mathbf{J}_e = 0. \quad (1.33)$$

Для кожного процесу, що викликає зміну J_i (збільшення температури відносно рівноважного значення), знайдеться обернений процес, що зробить протилежний внесок у потік J_i . Ця властивість відома як *умова детального балансу* — оберненість із часом елементарних процесів у системі, що описується консервативними рівняннями.

Нерівноважні стани пов'язані з незникаючими потоками між системою та середовищем, а також різницею в деяких змінних у \mathbf{x} , \mathbf{x}_e . Ці відмінності можуть набувати *перехідного* характеру — вони можуть миттєво з'являтися та

релаксувати у міру встановлення рівноважного стану між системою та середовищем. Однак таку різницю можна зробити сталою завдяки підтримці відповідних умов — *введенню обмежень*. Унаслідок сталої дії обмежень у нерівноважному стані детальна рівновага відсутня. В результаті нерівноважний стан набуває здатності до змін: невеликі локальні збурення від нерівноважного стану можуть бути освоєні, підсилені, становлячись джерелом новоутворень та різновидів.

У загальному випадку еволюційного рівняння

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\alpha, \mathbf{x}, t) \quad (1.34)$$

рівноважний стан задається умовою

$$\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{x}_{eq}) = 0. \quad (1.35)$$

Для нерівноважного стану можна записати

$$\mathbf{f}(\alpha, \mathbf{x}_0) = 0. \quad (1.36)$$

Відносно системи, що досліджується, ці рівняння накладають свої обмеження (позитивність температури, концентрації).



Приклад. Лінійні реакції

Нехай x — єдина змінна стану; k — стала швидкості; α — параметр зовнішнього обмеження. Нехай має місце реакція



згідно з якою змінна x задовольняє рівняння

$$\dot{x} = \alpha - kx.$$

Звідси стаціонарний стан задається розв'язанням рівняння

$$\alpha - kx = 0, \quad x_0 = \frac{\alpha}{k}.$$

Таким чином, згідно з одержаним лінійним законом можна прогнозувати стан системи за двома характерними точками.

У лінійних системах характерною особливістю є виконання принципу суперпозиції. Так, сумісна дія двох різних факторів зводиться до звичайної суперпозиції результатів дії кожного з них. В нелінійних системах мале збільшення

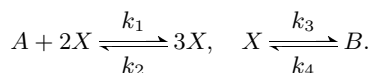
впливу зовнішнього середовища може привести до сильних ефектів, які несумірні за амплітудою з вихідним впливом (системи з гістерезисом).

При невеликому відхиленні від рівноваги нелінійність не може привести до значних ефектів — великої кількості розв'язків. При рівновазі виникає додаткова умова детальної рівноваги, яка фіксує єдиним чином змінну стану.



Приклад. Нелінійні реакції

Нехай існують дві спряжені реакції



За єдину змінну прийнято концентрацію реагенту X . Вважається, що речовини A , B постійно додаються або вилучаються із системи, підтримуючи постійність концентрацій a , b . У стані рівноваги з принципу детальної рівноваги маємо:

$$\begin{aligned} k_1 a x^2 &= k_2 x^3 & - & \text{швидкості прямої та зворотної реакції однакові;} \\ k_3 x &= k_4 b & - & \text{рівновага у другій реакції.} \end{aligned}$$

Ці співвідношення визначають рівноважну концентрацію речовини x

$$x_{eq} = \frac{k_4 b_{eq}}{k_3} = \frac{k_1 a_{eq}}{k_2}$$

та відношення рівноваги

$$\left(\frac{b}{a}\right)_{eq} = \frac{k_1 k_3}{k_2 k_4}.$$

З іншого боку, у стаціонарному стані вдалині від рівноваги має виконуватися лише вимога збалансованості сумарного впливу прямих реакцій сумарним впливом зворотних реакцій:

$$k_1 a x^2 - k_2 x^3 + k_3 x - k_4 b = 0.$$

Це кубічне рівняння відносно x може мати три розв'язки при певних значеннях a , b , що відрізняється від рівноважної ситуації. Тому нерівноважність проявляє потенційні особливості, що містяться в нелінійностях, які не проявляються в рівновазі. За наявності декількох розв'язків система може *вибирати* потрібний стан.

У загальному випадку силу $f(x)$, що визначає рівняння руху, можна подати як градієнт потенціальної функції $V(x)$, тобто має місце зв'язок

$$f = -\frac{dV}{dx}, \quad V(x) = -\int f(x') dx'. \quad (1.37)$$

Тоді така система називається *градієнтною*, її еволюційне рівняння має вигляд

$$\frac{d}{dt}x = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (1.38)$$

Особливості потенціальної функції нелінійних систем, в яких можливими стають ефекти самоорганізації, розглядаються теорією катастроф.

Розділ 2

Ентропія як міра самоорганізації

Одним із відомих макропараметрів, що дозволяє характеризувати колективні властивості системи на феноменологічних рівнях, є *ентропія*. Вона є мірою, що характеризує ступінь невизначеності щодо стану системи. Причому на низькоорганізованому рівні (у стані безладу) вона стає максимальною (повний безлад означає неможливість відрізнити один елемент системи від іншого), перехід до упорядкованого стану (високого рівня організації) супроводжується зменшенням ентропії та збільшенням інформації у системі. В упорядкованому стані система може зберігати інформацію, а в неупорядкованому — ні.

2.1 Інформація та ентропія [5, 6]

Мірою різниці малоінформативного повідомлення від інформативного є нечікуваність повідомлення. Це означає, що події з меншою апіорною імовірністю несуть більше інформації, ніж події з більшою апіорною імовірністю. Тому можна записати співвідношення між імовірністю та інформацією у вигляді

$$I = f\left(\frac{1}{P(X)}\right), \quad (2.1)$$

де f — поки що невідома функція, яку буде визначено нижче. Далі вважаємо інформацію адитивною величиною. Тоді, наприклад, для двох джерел інформації $I = I_1 + I_2$. У найпростішому випадку незалежних джерел імовірність факторизується: $P(X, Y) = P(X)P(Y)$. Умова адитивності інформації дає

$$f\left(\frac{1}{P(X, Y)}\right) = f\left(\frac{1}{P(X)P(Y)}\right) = f\left(\frac{1}{P(X)}\right) + f\left(\frac{1}{P(Y)}\right). \quad (2.2)$$

Такою функцією є логарифм, окрім того, вона єдина. Тоді

$$I = \ln \frac{1}{P(X)} = -\ln P(X), \quad I \geq 0. \quad (2.3)$$

Припустимо далі, що існує система, яка поводить, як джерело інформації з репертуаром із Λ дискретних стаціонарних станів. Нехай відомо, що система може переходити в кожен такий стан з імовірністю P_i . Виникає питання: яка невизначеність передбачення спостерігача відносно того, в якому стані система перебуває в поточний момент? Відповідь визначається середнім значенням

інформації

$$\langle I \rangle = - \sum_{i=1}^{\Lambda} P_i \log P_i, \quad (2.4)$$

яке має назву *інформаційної ентропії*. Якщо основою логарифма є 2, то одиниця вимірювання інформації — біт.

2.1.1 Умова максимуму ентропії

Накладемо на систему обмеження

$$\sum_{i=1}^{\Lambda} P_i = 1. \quad (2.5)$$

Нехай α — невідомий множник Лагранжа. Знайдемо умову максимуму ентропії. Для цього максимізуємо величину

$$\Psi = - \sum_{i=1}^{\Lambda} (P_i \log P_i - \alpha P_i) \quad (2.6)$$

за кожним P_i . Умова екстремуму

$$\frac{\partial \Psi}{\partial P_i} = -(\log P_i + 1 - \alpha), \quad (2.7)$$

тому $\log P = \alpha - 1$. Це означає, що всі ймовірності є тотожними. З умови нормування одержуємо $P_i = 1/\Lambda$. Тому максимум ентропії досягається, коли усі стани апіорі рівномірні. Максимальне значення ентропії дорівнює

$$S = S_{max} = - \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{1}{\Lambda} \log \frac{1}{\Lambda} = \log \Lambda. \quad (2.8)$$

Ентропія системи з N частин. Нехай існує система, що складається з N взаємодіючих частин, які належать Λ різним категоріям, розподіленим за певним класифікаційним критерієм. Нехай N_i — населеність i -го класу, $i \in \{1, \dots, \Lambda\}$, $\sum_{i=1}^{\Lambda} N_i = N$.

Кількість макроскопічних утворень (комплексів), що відповідають за один макроскопічний стан, визначається за формулою

$$W = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{\Lambda} N_i!}. \quad (2.9)$$

Якщо всі комплекси є рівноймовірними, то ймовірність вибрати комплекс, відповідний за даний макростан, є $P = W^{-1}$.

Виникає питання: яка невизначеність (інформація, яку необхідно добути) того, який з комплексів відповідає за стан, що спостерігається? Нехай існує дві частини. Нехай W_1, W_2 — кількість комплексів, що відповідають за стани в першій і другій частинах. Зрозуміло, що $W = W_1 W_2$.

Ступінь незнання (ентропія), із якою мікростан відповідає за макростан, дорівнює $S_1 = S(W_1)$ для першої та $S_2 = S(W_2)$ для другої частини системи. Враховуючи властивості адитивності ентропії, для всієї системи одержуємо

$$S(W) = S(W_1 W_2) = S_1 + S_2. \quad (2.10)$$

Проводячи диференціювання за W_2 , маємо

$$\frac{\partial S}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial W_2} - \frac{\partial S_2}{\partial W_2} = W_1 \frac{\partial S}{\partial W} - \frac{\partial S_2}{\partial W_2} = 0. \quad (2.11)$$

Проводячи тепер диференціювання за W_1 , одержуємо

$$\begin{aligned} & W_1 \frac{\partial^2 S}{\partial W^2} \frac{\partial W}{\partial W_1} + \frac{\partial S}{\partial W} = \\ & = W_1 W_2 \frac{\partial^2 S}{\partial W^2} + \frac{\partial S}{\partial W} = \\ & = W \frac{\partial^2 S}{\partial W^2} + \frac{\partial S}{\partial W} = 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Розв'язок цього рівняння має вигляд

$$S = c_1 \ln W + c_0, \quad (2.13)$$

де c_0 — стала, що визначається початковими умовами; c_1 — зводиться до сталої Больцмана $k = 1.38 \times 10^{-23}$ Дж/К.

Припустимо далі, що $\Lambda = 2$, тоді $W = N! / N_1! N_2!$, $N_1 + N_2 = N$. У наближенні $N_1, N_2 \gg 1$ формула Стірлінга

$$n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n} \quad (2.14)$$

дає

$$\ln(n!) \approx n \ln(n) - n + \frac{1}{2} \ln(n) + c \sim n[\ln(n) - 1], \quad \text{при } n \gg 1, \quad (2.15)$$

тому

$$\ln(N_i!) \approx N_i[\ln N_i - 1]. \quad (2.16)$$

У результаті для ентропії маємо

$$\begin{aligned} S &= \ln W = \ln N! - \ln N_1! - \ln N_2! \approx \\ &\approx N[\ln N - 1] - N_1[\ln N_1 - 1] - N_2[\ln N_2 - 1] = \\ &= N \ln N - N_1 \ln N_1 - N_2 \ln N_2 = \ln \left(\frac{N^N}{N_1^{N_1} N_2^{N_2}} \right) = \\ &= -\ln \left(\frac{N_1^{N_1} N_2^{N_2}}{N^N} \right) = -\ln \left[\left(\frac{N_1}{N} \right)^{N_1} \left(\frac{N_2}{N} \right)^{N_2} \right] = \\ &= -N_1 \ln \left(\frac{N_1}{N} \right) - N_2 \ln \left(\frac{N_2}{N} \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Поділивши все на N , одержуємо ентропію на один ступінь вільності

$$\langle S \rangle = \frac{S}{N} = -\frac{N_1}{N} \ln \left(\frac{N_1}{N} \right) - \frac{N_2}{N} \ln \left(\frac{N_2}{N} \right). \quad (2.18)$$

За умови $N, N_1, N_2 \gg 1$ можна одержати вирази для ймовірностей за формулою

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} (N_i/N),$$

що дає

$$\langle S \rangle = -\sum_{i=1}^N P_i \ln P_i. \quad (2.19)$$

У такому разі одиниця вимірювання ентропії — нат.

Зв'язок між інформаційною та фізичною ентропією є таким:

$$\langle S \rangle = -\ln 2 \sum_{i=1}^N P_i \log_2 P_i = \ln 2 \langle I \rangle. \quad (2.20)$$

2.1.2 Зв'язок інформації й ентропії

Якщо розглядати текст повідомлення як набір із N символів, кожен із яких має свою ймовірність P_i , то інформація повідомлення визначається формулою

$$I = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i. \quad (2.21)$$

Якщо таке повідомлення є визначеним (інформативним), то його ентропія дорівнює нулю, оскільки воно відповідає єдиному тексту і розуміється однозначно. Якщо тепер замінити деякі символи або переставити символи, то залишається окрема частина інформації такого повідомлення і з'являється його невідзначеність. У граничному випадку заміни N символів тексту інформація повідомлення втрачається, а ентропія зростає й буде дорівнювати

$$S = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i. \quad (2.22)$$

Таким чином, існує закон збереження суми інформації та ентропії

$$S + I = \text{const}. \quad (2.23)$$

Хоча ентропія та інформація визначаються однією формулою $I, S = \ln \Lambda$, слід проводити різницю між цими поняттями. Інформація відповідає одній єдиній вибірці з великої кількості Λ можливих станів. Ентропія відповідає можливості знаходження системи з ймовірністю $1/\Lambda$ в кожному з доступних станів. Наприклад, об'єм інформації I відповідає даному тексту, для якого існує одне правило написання літер, тобто $\Lambda = 1$, тому $S = \ln 1 = 0$. У стані термодинамічної рівноваги існує Λ можливих станів, тому $S = \ln \Lambda \neq 0$ — максимальне заповнення станів. Окрім того, стану рівноваги відповідає ситуація, коли всі літери розмиваються (руйнуються структури), тобто система стає однорідною, і прочитати такий текст неможливо. Це означає, що ентропія тексту підвищилась, а інформація — зменшилась.

2.1.3 Зростання ентропії

Згідно з другим законом термодинаміки ентропія замкненої системи має зростати і залишається максимальною в стані термодинамічної рівноваги. З'ясуємо умови, коли система, що надана сама собі, переходить у стан із максимальним безладом.

Розглянемо конструкцію

$$S = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i, \quad P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} (N_i/N). \quad (2.24)$$

При великих N маємо

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{N_i}{N} \ln \frac{N_i}{N} = - \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{N_i}{N} (\ln N_i - \ln N) = \\ &= \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{N_i}{N} \ln N - \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{N_i \ln N_i}{N} = \frac{1}{N} \left(N \ln N - \sum_{i=1}^{\Lambda} N_i \ln N_i \right). \end{aligned} \quad (2.25)$$

За умови

$$\sum_{i=1}^{\Lambda} N_i = N = \text{const}, \quad \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{\partial N_i}{\partial t} = \frac{\partial N}{\partial t} = 0 \quad (2.26)$$

маємо

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\Lambda} \left(\frac{\partial N_i}{\partial t} + \frac{\partial N_i}{\partial t} \ln N_i \right) = - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\Lambda} \frac{\partial N_i}{\partial t} \ln N_i. \quad (2.27)$$

Нехай p_{ij} — ймовірність переходу $i \rightarrow j$. Тоді еволюція числа частинок у відсіку i визначається рівнянням

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = - \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ij} N_i + \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ji} N_j. \quad (2.28)$$

За допомогою початкової умови молекулярного хаосу (повної відсутності кореляцій між положенням частинок) приходимо до рівняння $p_{ij} = p_{ji}$. У результаті маємо

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ij} (N_j - N_i). \quad (2.29)$$

Тоді для ентропії одержуємо

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\Lambda} \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ij} (N_i - N_j) \ln N_i. \quad (2.30)$$

Перестановка індексів i та j не відбивається на лівій частині рівняння, що дозволяє записати

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\Lambda} \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ji}(N_j - N_i) \ln N_j = -\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{\Lambda} \sum_{i=1}^{\Lambda} p_{ij}(N_i - N_j) \ln N_j. \quad (2.31)$$

Додаючи одне до одного, маємо

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{\Lambda} \sum_{j=1}^{\Lambda} p_{ij}(N_i - N_j)(\ln N_i - \ln N_j) \geq 0. \quad (2.32)$$

Рівність нулю маємо лише для $N_i = N_j$ при всіх i, j — у стані абсолютної однорідності або в стані ідеальної симетрії, що є виразом стану термодинамічної рівноваги. Таким чином, при $n \rightarrow \infty$ функція $S = S(t)$ є монотонно (необернено) зростаючою і досягає стаціонарного значення, що відповідає рівноважному стану системи, із якого неможливо «витягнути» будь-якої інформації.

2.1.4 Максимальність ентропії при обмеженнях [6]

З'ясуємо вигляд функції розподілу, для якої ентропія стає максимальною. Розглянемо континуальну границю, де

$$S = - \int dx p(x) \ln p(x). \quad (2.33)$$

Для функції $p(x)$ маємо умову нормування

$$\int p(x) dx = 1 \quad (2.34)$$

та визначення величин, що характеризують систему загалом (дисперсія, енергія, центр мас та ін.):

$$\int p(x) f^{(k)}(x) dx = \langle f_k \rangle, \quad k \in [0, \dots, N]. \quad (2.35)$$

Задачу знаходження екстремуму інформаційної ентропії розв'язуємо за допомогою використання множників Лагранжа. Тоді варіація функціонала

$$\Psi = - \int p(x) \ln p(x) dx - (\alpha - 1) \int p(x) dx - \sum_k \lambda_k \int p(x) f^{(k)}(x) dx \quad (2.36)$$

дає

$$-\ln p - 1 - (\alpha - 1) - \sum_k \lambda_k f^{(k)} = 0. \quad (2.37)$$

Розв'язуючи це рівняння відносно p , маємо

$$p = \exp \left(-\alpha - \sum_k \lambda_k f^{(k)} \right). \quad (2.38)$$

Використання умови нормування дає

$$e^{-\alpha} \int dx \exp \left(-\sum_k \lambda_k f^{(k)} \right) = 1. \quad (2.39)$$

Введемо позначення

$$Z(\boldsymbol{\lambda}) \equiv \int dx \exp \left(-\sum_k \lambda_k f^{(k)} \right), \quad \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots), \quad (2.40)$$

яке дозволяє визначити множник Лагранжа

$$\alpha = \ln Z. \quad (2.41)$$

Для знаходження інших множників використовуємо визначення середнього, що дає

$$\langle f_k \rangle = e^{-\alpha} \int dx \exp \left(-\sum_n \lambda_n f^{(n)} \right) f^{(k)}. \quad (2.42)$$

Враховуючи визначення α , одержаний вираз можна записати у еквівалентній формі завдяки диференціюванню за λ_k . Тоді маємо

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{Z} \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda_k} \right) \int dx \exp \left(-\sum_n \lambda_n f^{(n)} \right), \quad (2.43)$$

або

$$\langle f_k \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_k}. \quad (2.44)$$

Таким чином, вираз для максимальної ентропії набуває вигляду

$$\begin{aligned} S_{\max} &= \alpha \int dx p(x) - \sum_k \lambda_k \int dx p(x) f^{(k)}(x) = \\ &= \alpha + \sum_k \lambda_k \langle f_k \rangle. \end{aligned} \quad (2.45)$$

З'ясуємо, яким чином змінюється ентропія при зміні функцій $f^{(k)}(x)$. Слід врахувати, що ентропія й множники Лагранжа залежать від $f^{(k)}(x)$. Обчислимо варіацію α :

$$\delta\alpha = \delta \ln Z = \frac{\delta Z}{Z}. \quad (2.46)$$

Згідно з визначенням Z маємо

$$\delta\alpha = e^{-\alpha} \int dx \sum_k \left(-\delta\lambda_k f^{(k)} - \lambda_k \delta f^{(k)} \right) \exp \left(-\sum_n \lambda_n f^{(n)} \right). \quad (2.47)$$

Використовуючи визначення (2.38), це рівняння переписується у вигляді

$$\begin{aligned} \delta\alpha &= -\sum_k \left(\delta\lambda_k \int dx p(x) f^{(k)} + \lambda_k \int dx p(x) \delta f^{(k)}(x) \right) = \\ &= -\sum_k (\delta\lambda_k \langle f_k \rangle + \lambda_k \langle \delta f_k \rangle). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Тоді для варіації ентропії маємо

$$\delta S_{\max} = \delta\alpha + \delta \left(\sum_k \lambda_k \langle f_k \rangle \right) = \sum_k \lambda_k (\delta \langle f_k \rangle - \langle \delta f_k \rangle) \equiv \sum_k \lambda_k \delta Q_k, \quad (2.49)$$

де ми ввели узагальнену теплоту

$$\delta Q_k = \delta \langle f_k \rangle - \langle \delta f_k \rangle. \quad (2.50)$$



Приклад. Зміна середньої величини відносно параметра

У багатьох випадках слід обчислити зміну середньої величини відносно певного параметра ε :

$$\left\langle \frac{\partial f_\varepsilon^{(k)}}{\partial \varepsilon} \right\rangle = \int dx p(x) \frac{\partial f_\varepsilon^{(k)}}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{Z} \int dx \frac{\partial f_\varepsilon^{(k)}}{\partial \varepsilon} \exp \left(-\sum_n \lambda_n f^{(n)} \right) = -\frac{1}{Z} \frac{1}{\lambda_k} \frac{\partial Z}{\partial \varepsilon}. \quad (2.51)$$

Таким чином, одержуємо

$$\left\langle \frac{\partial f_\varepsilon^{(k)}}{\partial \varepsilon} \right\rangle = -\frac{1}{\lambda_k} \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon}. \quad (2.52)$$

2.2 Елементи рівноважної термодинаміки [6, 7]

Нехай f у попередніх формулах відіграє роль енергії E , параметр ε ототожнюємо з об'ємом V . Тоді

$$\text{для } k = 1 : \begin{cases} \langle f_1 \rangle \leftrightarrow U \equiv \langle E \rangle, \\ \varepsilon \leftrightarrow V, \\ \lambda_1 = \beta, \end{cases} \quad (2.53)$$

а розподіл (2.38) набуває вигляду

$$p(E) = \exp(-\alpha - \beta E(V)). \quad (2.54)$$

Відповідно для максимальної ентропії одержуємо

$$S_{\max} = \ln Z + \beta U, \quad \text{де } U - \beta^{-1} S_{\max} = -\beta^{-1} \ln Z. \quad (2.55)$$

Це співвідношення задає вільну енергію системи

$$F = U - TS, \quad F = -T \ln Z, \quad \beta = 1/T, \quad (2.56)$$

де T — температура. Відповідно для Z маємо визначення

$$Z = \int dE \exp(-\beta^{-1} E) = \int dE \exp(-E/T), \quad (2.57)$$

З фізичної точки зору Z — статистична сума.

Залежні та незалежні змінні. За визначенням S_{\max} є функцією від α , λ_k , $\langle f_k \rangle$. Параметри α , λ_k визначаються як функції від $\langle f_k \rangle$, $f^{(k)}$, які вважаються заданими величинами. Таким чином, незалежними змінними є $\langle f_k \rangle$, $f^{(k)}$, залежними — α , λ_k , S_{\max} . На практиці $f^{(k)}$ залежить від ε , тому дійсно незалежними змінними є $\langle f_k \rangle$, ε . Тоді можна покласти $S_{\max} = S = S(\langle f_k \rangle, \varepsilon)$, або

$$S = S(U, V). \quad (2.58)$$

Варіація внутрішньої енергії U за умови незмінності об'єму $V = \text{const}$ дає

$$\delta \langle f_1 \rangle = \delta U \neq 0, \quad \delta f^{(1)} = \delta E(V) = 0, \quad (2.59)$$

тому

$$\delta S = \lambda_1 \delta U, \quad \text{де } \frac{\delta S}{\delta U} = \frac{1}{T}. \quad (2.60)$$

Тобто у обмеженому об'ємі система збільшує свою теплоту при збільшенні внутрішньої енергії.

У випадку незмінної внутрішньої енергії $U = const$ і варіації об'єму V маємо:

$$\delta\langle f_1 \rangle = \delta U = 0, \quad \langle \delta f^{(1)} \rangle = \left\langle \frac{\delta E(V)}{\delta V} \right\rangle \delta V \neq 0. \quad (2.61)$$

Тоді для варіації ентропії одержуємо

$$\delta S = -\lambda_1 \left\langle \frac{\delta E(V)}{\delta V} \right\rangle \delta V, \quad \text{де} \quad \frac{\delta S}{\delta V} = -\frac{P}{T}, \quad (2.62)$$

тут введено позначення для тиску

$$P = - \left\langle \frac{\delta E(V)}{\delta V} \right\rangle. \quad (2.63)$$

Комбінуючи вирази (2.60), (2.62), одержуємо загальний вираз для теплоти

$$\delta Q \equiv T\delta S = \delta U + P\delta V. \quad (2.64)$$

Якщо в системі існують частинки різного сорту, де N_k — кількість частинок k -го сорту, використовується заміна $\langle f_1 \rangle = U$, $\langle f_{1+k'} \rangle = \overline{N_{k'}}$. При цьому $\lambda_{k+1} = -\mu_k/T$, де μ_k — хімічний потенціал, для якого

$$\frac{1}{T}\mu_k = \frac{\partial S}{\partial \overline{N_k}}. \quad (2.65)$$

Для термодинамічних потенціалів, що містять кількість частинок N , маємо

$$\begin{aligned} \delta U &= T\delta S - P\delta V + \mu\delta N, \\ \delta F &= -S\delta T - P\delta V + \mu\delta N. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Вільна енергія та розподіл Гіббса. Згідно з одержаною формулою для розподілу $p(E) = \exp(-\alpha - \beta E)$, де $\alpha = \ln Z$, $Z = \int dE \exp(-\beta^{-1}E)$, $\beta = 1/T$, використовуючи визначення вільної енергії $F = -T \ln Z$, для розподілу одержуємо

$$p(E) = \exp\left(\frac{F - E}{T}\right). \quad (2.67)$$

Ця формула задає розподіл рівноважної системи і має назву *розподілу Гіббса*. У класичному випадку внутрішня енергія є функцією від координат та імпульсів. Тобто $E = E(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ і розпадається на суму кінетичної $K(\mathbf{p})$ (квадратичної

за імпульсами) та потенціальної енергії $V(\mathbf{q})$. Тоді при нормуванні розподілу Гіббса слід враховувати інтегрування у фазовому просторі з елементом об'єму $d^s\Gamma = (d\mathbf{p}d\mathbf{q}/2\pi)^s$ (s — кількість ступенів вільності):

$$\mathcal{F} = -T \ln \int' d^s\Gamma e^{-E(\mathbf{p},\mathbf{q})/T} = -T \ln \int' \left(\frac{d\mathbf{p}d\mathbf{q}}{2\pi} \right)^s \exp \left(-\frac{K(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})}{T} \right), \quad (2.68)$$

де інтегрування проводиться за різними станами системи.

2.3 Особливості відкритих систем [1, 4]

Ізольовані системи. За другим законом термодинаміки еволюція системи, не здатної обмінюватись речовиною та енергією із зовнішнім середовищем, спрямована на досягнення стану рівноваги, для якого характерним є зростання ентропії

$$\frac{dS}{dt} \geq 0. \quad (2.69)$$

Для ізольованих систем це означає, що спонтанне виникнення упорядкованих структур стає неможливим, оскільки упорядкування супроводжується зниженням ентропії. Тому в стані повної рівноваги (молекулярний хаос) ізольована система є повністю неінформативною, і вона не здатна зберігати інформацію.

Замкнуті системи. Для замкнутої системи допускається обмін енергією із зовнішнім середовищем при сталій температурі. Поведінка такої системи визначається термодинамічним потенціалом типу вільної енергії

$$F = U - TS.$$

У стані рівноваги енергія системи є мінімальною.

Припустимо, що система може знаходитися на різних енергетичних рівнях, тоді імовірність знаходження системи на рівні E_i є такою:

$$p(E_i) \propto \exp(-E_i/T). \quad (2.70)$$

Низьким температурам будуть відповідати рівні з малими значеннями E_i (при низькій ентропії створюється кристал). Зростання температури супроводжується вирівнюванням внесків ентропії S та внутрішньої енергії U у потенціал вільної енергії F . Тому заселеність різних енергетичних рівнів прагне вирівнятися. Таким чином, у неізольованих системах стають можливими упорядковані структури з малими значеннями ентропії.

Відкриті системи. Відкриті системи характеризуються ненульовими обмінними потоками речовини та енергії із середовищем. Другий закон термодинаміки для відкритих систем характеризує зміну повної ентропії, що складається з ентропії середовища та системи.

Нехай ентропія змінюється на dS за час dt , причому розіб'ємо цю зміну на окремі внески:

$$dS = d_e S + d_i S, \quad (2.71)$$

де $d_e S$ — потік ентропії, обумовлений обміном із середовищем; $d_i S$ — виробництво ентропії всередині системи, обумовлене незворотними процесами. З другого закону термодинаміки випливає

$$d_i S \geq 0. \quad (2.72)$$

Для ізольованої системи $d_e S = 0$, тому

$$dS = d_i S \geq 0. \quad (2.73)$$

У відкритих системах $d_i S \geq 0$, а $d_e S$ не має певного знака. Це дозволяє подати еволюцію як процес, в якому система досягає стану з меншим значенням ентропії, ніж у початковому стані:

$$\Delta S = \int dS < 0. \quad (2.74)$$

Цей стан є малоімовірним, але існувати може достатньо довго при досягнанні системою стаціонарного стану $dS = 0$ або

$$d_e S = -d_i S < 0. \quad (2.75)$$

Таким чином, якщо із системи відходить великий потік ентропії (надходить негативний потік або надходить інформація), то в ній підтримується упорядкована конфігурація. Це є можливим лише в нерівноважних умовах, інакше $d_e S = 0$, $d_i S = 0$. Таким чином, нерівноважність є джерелом упорядкованості.

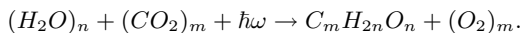
Природним буде питання про встановлення сумісності другого закону термодинаміки із зменшенням ентропії та про механізми підтримки упорядкованого стану. В природі існують системи з двома типами поведінки: 1) системи, що прямують до неупорядкованого стану при одних умовах; 2) ті, що прямують до когерентного стану при інших умовах. Порушення упорядкування має місце в області термодинамічної рівноваги. Упорядкований стан виникає лише вдалині від рівноваги за умов підпорядкування системи нелінійним законам певного

типу. В такому випадку виникнення упорядкування супроводжується нестійкістю станів, властивих звичайній термодинамічній поведінці (неупорядкованим станам). Виробництво ентропії супроводжується явищем диференціації матерії, що зумовлює зростання складності системи. На такому ієрархічному рівні складності проявляється ефект самоорганізації — система, перейшовши поріг складності, знаходить властивість автономно самовідтворюватись.



Приклад. Синтез складної молекули

Сонячне світло, що потрапляє на Землю, зосереджене в малому куті. Це означає малу його ентропію, тобто велике виробництво інформації ($dI/dt \sim 4 \times 10^{19} \text{ bit} \times \text{cm}^{-2} \text{c}^{-1}$). Таке випромінювання надходить із малою ентропією, а відходить з набагато більшою. Загальне зростання ентропії супроводжується локальним зменшенням за рахунок утворення упорядкованих складних структур, частка інформації, що належить до них, зростає, а ентропія спадає. Так, молекули хлорофілу використовують енергію фотонів при створенні складної речовини — глюкози $C_6H_{12}O_6$:



Збільшення складності супроводжується виробництвом ентропії, яка перевищує недолік ентропії у сонячному світлі, що індукує реакцію.

Розділ 3

Біфуркації та їх аналіз

У синергетиці вивчаються загальні властивості складних систем. Досягнення поставленої мети дослідження стає можливим завдяки зосередженню уваги на якісних змінах макроскопічної поведінки системи. Такі якісні зміни відомі як нестійкості, що виникають при біфуркаціях [3, 8, 9].

3.1 Загальний підхід

Розглянемо загальний вигляд еволюційного рівняння

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \nabla, \mathbf{r}, t; \boldsymbol{\alpha}). \quad (3.1)$$

Припустимо, що нелінійна сила не залежить явно від часу, тобто система є *автономною*. Нехтуючи залежністю від просторової координати, маємо

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t); \boldsymbol{\alpha}). \quad (3.2)$$

Припустимо, що при певному значенні керуючого параметра існує стійкий стан $\mathbf{x}_0(\alpha_0)$, одержаний за умови

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_0(\boldsymbol{\alpha}); \boldsymbol{\alpha}) = 0. \quad (3.3)$$

Для дослідження стійкості відносно збурень припустимо, що

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}(t), \quad (3.4)$$

де \mathbf{x}_0 — стаціонарний стан; $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ — мале збурення. Підставляючи цей розв'язок у вихідне рівняння еволюції, одержуємо

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0(\boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\varepsilon}(t); \boldsymbol{\alpha}). \quad (3.5)$$

Оскільки $\boldsymbol{\varepsilon}$ є малою величиною, то можна провести розкладання в ряд за степенями компонент вектора відхилення $\boldsymbol{\varepsilon}$. Тоді можна записати

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \underbrace{\mathbf{f}(\mathbf{x}_0(\boldsymbol{\alpha}); \boldsymbol{\alpha})}_{=0} + \sum_k \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}_0(\boldsymbol{\alpha}); \boldsymbol{\alpha})}{\partial x_k} \varepsilon_k(t) + \underbrace{O(\varepsilon_k^2)}_{\simeq 0} = \sum_k \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}_0(\boldsymbol{\alpha}); \boldsymbol{\alpha})}{\partial x_k} \varepsilon_k(t), \quad (3.6)$$

де перший член дорівнює нулю, третій перевищує порядок малості. У компактному вигляді маємо такий запис:

$$\dot{\varepsilon} = \widehat{L}\varepsilon, \quad \widehat{L} \equiv \widehat{L}(\mathbf{x}_0), \quad (3.7)$$

оператор \widehat{L} залежить від часу так само, як і ε . Нехай $\mathbf{x}_0 = const$, тоді, припустивши, що

$$\varepsilon(t) = e^{\lambda t} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = const, \quad (3.8)$$

і підставляючи у рівняння для збурення, одержуємо

$$\widehat{L}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}. \quad (3.9)$$

Це рівняння для сталого вектора \mathbf{v} та власного значення λ .

Якщо \widehat{L} — матриця порядку n , то одержуємо систему лінійних рівнянь, для якої існує n власних значень $\lambda_i = \lambda_i(\alpha)$. Нестійкий стан виникає, коли дійсна частина хоча б одного із власних значень $\{\lambda_i\}$ стає позитивною.

3.2 Біфуркації подвоєння

Лінійні рівняння зі сталими коефіцієнтами. Розглянемо загальний випадок, коли розв'язок типового лінійного рівняння

$$\dot{\mathbf{x}} = \widehat{L}\mathbf{x}$$

набуває вигляду

$$\mathbf{x}(t) = e^{\widehat{L}t} \mathbf{x}(0),$$

де \widehat{L} — матриця сталих коефіцієнтів. Наведений розв'язок набуває сенсу, якщо подати експоненту у вигляді

$$e^{\widehat{L}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\widehat{L}t)^n.$$

Цей ряд є кінцевим у тому сенсі, що кожен елемент матриці $\exp(\widehat{L}t)$ — кінцевий. Легко бачити, що вихідне рівняння можна записати у вигляді

$$\dot{\mathbf{x}} = \widehat{L}e^{\widehat{L}t} \mathbf{x}(0).$$

Для різних початкових компонент $\{\mathbf{x}^{(i)}(0)\}$ одержуємо різні розв'язки $\{\mathbf{x}^{(i)}(t)\}$. Якщо початкові вектори є незалежними, то незалежними будуть і $\{\mathbf{x}^{(i)}(t)\}$.

Теорема 3.1 Розв'язки $\mathbf{x}^{(i)}(t)$ можна вибрати так, щоб вони мали вигляд

$$\mathbf{x}^{(i)}(t) = e^{\lambda_i t} \mathbf{v}^{(i)}(t).$$

Показники Ляпунова λ_i — власні значення матриці \hat{L} . Вектори $\mathbf{v}^{(i)}(t)$ набувають вигляду

$$\mathbf{v}^{(i)}(t) = \sum_{j=0}^{m_i} \mathbf{v}_j^{(i)} t^j,$$

де m_i — ступінь виродження власного значення λ_i .

Біфуркація з одного вузла (фокуса) у два вузли (фокуси). Розглянемо еволюційне рівняння

$$\dot{x} = \lambda x + \varphi(x), \quad (3.10)$$

де

$$\varphi(x) = -\beta x^3. \quad (3.11)$$

Тоді маємо

$$\dot{x} = \lambda x - \beta x^3 = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad V = -\frac{\lambda}{2} x^2 + \frac{\beta}{4} x^4. \quad (3.12)$$

З вигляду потенціальної кривої зрозуміло, що залежно від знака λ стають можливими два різні випадки: при $\lambda < 0$ розв'язок $x_0 = 0$ є стаціонарним та стійким (вузол); при $\lambda > 0$ розв'язок $x_0 = 0$ стає нестійким (сідло), стійкі розв'язки (вузли) є такими $x_0^{(1)} = \sqrt{\lambda/\beta}$, $x_0^{(2)} = -\sqrt{\lambda/\beta}$. Стаціонарні стани дозволяють розкласти праву частину рівняння (3.12) у добуток лінійних множників

$$\dot{x} = -\beta(x - x_0^{(0)})(x - x_0^{(1)})(x - x_0^{(2)}). \quad (3.13)$$

У загальному випадку

$$\dot{x} = f(x; \alpha), \quad (3.14)$$

за умови існування m розв'язків стаціонарного рівняння $f(x; \alpha) = 0$ можна записати

$$\dot{x} = C[x - x_0^{(0)}(\alpha)] \cdots [x - x_0^{(k)}(\alpha)] \cdots [x - x_0^{(m)}(\alpha)], \quad (3.15)$$

де $x_k(\alpha)$ — корені багаточлена $f(x; \alpha)$. Стійкість коренів досліджується стандартним способом: визначається картина еволюції лінійних збурень та встановлюються значення показників Ляпунова. Аналіз еволюції системи у нелі-

нійній області стає можливим завдяки розділенню змінних, що дозволяє записати

$$t - t_0 = \int_{x_0}^x \frac{dx}{f(x; \alpha)}. \quad (3.16)$$

3.3 Біфуркація з фокуса в цикл (біфуркація Хопфа)

Біфуркація Хопфа виникає, коли два комплексно спряжених власних значення

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda' + i\omega, \\ \lambda_2 &= \lambda' - i\omega, \end{aligned} \quad (3.17)$$

де λ' , $\omega \neq 0$ — дійсні числа, перетинають уявну вісь так, що $\lambda' \geq 0$. При цьому виникають коливання і відбувається біфуркація з початково стійкого фокуса у граничний цикл.

Розглянемо систему, що описується рівнянням

$$\dot{x} = (\lambda + i\omega)x - \beta x|x|^2, \quad \beta > 0. \quad (3.18)$$

Його розв'язок шукається у вигляді

$$x(t) = r(t) \exp(i\psi(t) + i\omega t), \quad r \geq 0, \quad (3.19)$$

$\psi(t)$ — дійсна функція. Шляхом прямої підстановки можна одержати

$$\dot{r} + (i\dot{\psi} + i\omega)r = (\lambda + i\omega)r - \beta r^3. \quad (3.20)$$

Звідси для дійсної та уявної частин маємо

$$\dot{\psi} = 0, \quad (3.21)$$

$$\dot{r} = \lambda r - \beta r^3. \quad (3.22)$$

За умови позитивності r стаціонарні розв'язки другого рівняння є такими:

$$r_0 = 0 \quad \text{при} \quad \lambda < 0, \quad (3.23)$$

$$r_0 = 0, \quad r_0^{(1)} = +\sqrt{\lambda/\beta} \quad \text{при} \quad \lambda \geq 0. \quad (3.24)$$

Для функції $\psi(t)$ розв'язок існує незалежно від значення λ : $\psi(t) = \psi_0 = const$. Рівняння для r має такий розв'язок:

$$r(t) = r_0 [1 + c_0 r_0 e^{-2\lambda t}]^{-1/2}. \quad (3.25)$$

Стационарний розв'язок має вигляд

$$x(t) = r_0 \exp(i\psi_0 + i\omega t). \quad (3.26)$$

Він показує, що при $r_0 > 0$ система здійснює коливання з амплітудою $2r_0$ та частотою ω із початковою фазою ψ_0 . Траєкторії, що розміщені поблизу граничного циклу, притягуються до нього.

У випадку комплексного $\beta = \beta' + i\beta''$, де β' , β'' — дійсні числа, маємо рівняння еволюції у вигляді

$$\dot{x} = (\lambda + i\omega)x - (\beta' + i\beta'')x|x|^2, \quad \beta' > 0. \quad (3.27)$$

Його розв'язок шукається у вигляді

$$x(t) = r(t)e^{i\varphi(t)}, \quad r \geq 0, \quad \varphi — \text{дійсна функція}. \quad (3.28)$$

Пряма підстановка розв'язку в рівняння дозволяє розділити дійсну та уявну частини, для яких можна записати

$$\dot{r} = \lambda r - \beta' r^3, \quad (3.29)$$

$$\dot{\varphi} = \omega - \beta'' r^2. \quad (3.30)$$

Враховуючи розв'язок (3.25) та підставляючи його у рівняння для φ , маємо

$$\varphi(t) = \underbrace{(\omega - \beta''(r_0^{(1)})^2)}_{\Omega} t - \underbrace{\frac{\beta''}{2\beta'} \ln(\beta' + c_0 \lambda e^{-2\lambda t})}_{\varphi_0}. \quad (3.31)$$

Одержаний розв'язок показує, що частота коливань Ω залежить від їх амплітуди. Таким чином, при біфуркації Хопфа виникає граничний цикл та відбувається зміщення частот.

У складнішому випадку можна розглянути систему, що описується рівнянням

$$\dot{x} = (\lambda + i\omega)x - x [P(|x|^2) + iQ(|x|^2)], \quad (3.32)$$

де P , Q — дійсні функції, багаточлени. Розв'язок рівняння, як і раніше, шукається у вигляді (3.28), що дозволяє розділити дійсну та уявну частини, для яких відповідно маємо

$$\dot{r} = \lambda r - rP(|r|^2), \quad (3.33)$$

$$\dot{\varphi} = \omega - Q(|r|^2). \quad (3.34)$$

Їхній розв'язок шукається у квадратурах.

3.3.1 Синхронізація двох осциляторів

Нехай система двох осциляторів описується рівняннями

$$\dot{x}_1 = (\lambda_1 + i\omega_1)x_1 - \beta_1 x_1 |x_1|^2 + \gamma_1 x_2 |x_2|^2, \quad (3.35)$$

$$\dot{x}_2 = (\lambda_2 + i\omega_2)x_2 - \beta_2 x_2 |x_2|^2 + \gamma_2 x_1 |x_1|^2. \quad (3.36)$$

Їх розв'язок доцільно шукати у вигляді

$$x_j(t) = r_j(t)e^{i\varphi_j(t)}, \quad \varphi_j(t) = \omega'_j t + \psi_j(t), \quad j = 1, 2. \quad (3.37)$$

Безпосередня підстановка розв'язку, наприклад, у перше рівняння дає

$$\dot{r}_1 + i\dot{\varphi}r_1 = (\lambda_1 + i\omega_1)r_1 - \beta_1 r_1^3 + \gamma_1 r_2^3 e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}, \quad (3.38)$$

яке записується у вигляді рівнянь для амплітуди та фази

$$\dot{r}_1 = \lambda_1 r_1 - \beta_1 r_1^3 + \gamma_1 r_2^3 \Re\{e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}\}, \quad (3.39)$$

$$\dot{\varphi}_1 = \omega_1 + \gamma_1 (r_2^3 / r_1) \Im\{e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}\}. \quad (3.40)$$

Аналогічно одержуємо рівняння для r_2 та φ_2 .

Припустивши $\gamma_1 \ll 1$, для стаціонарних розв'язків маємо

$$r_{1,0} = \sqrt{\lambda_1 / \beta_1}, \quad r_{2,0} = \sqrt{\lambda_2 / \beta_2}. \quad (3.41)$$

В околі стаціонарних розв'язків для r_j можна записати

$$\dot{\varphi}_1 = \omega_1 + \gamma_1 (r_2^3 / r_1)_0 \sin(\varphi_2 - \varphi_1), \quad (3.42)$$

$$\dot{\varphi}_2 = \omega_2 - \gamma_2 (r_1^3 / r_2)_0 \sin(\varphi_2 - \varphi_1). \quad (3.43)$$

Якщо ввести нову змінну $\phi = \varphi_2 - \varphi_1$ та різницю частот $\varpi = \omega_2 - \omega_1$, то одержуємо

$$\dot{\phi} = \varpi - \alpha \sin \phi, \quad \alpha = \gamma_2 (r_1^3 / r_2)_0 + \gamma_1 (r_2^3 / r_1)_0. \quad (3.44)$$

Це рівняння розв'язується розділенням змінних

$$t = \int_{\phi(t_0)}^{\phi(t)} \frac{d\phi}{\varpi - \alpha \sin \phi}. \quad (3.45)$$

Залежно від співвідношення між α та ϖ можливі різні режими поведінки системи.

Випадок $|\alpha| < |\varpi|$. Тут підінтегральний вираз не є розбіжним, тому його можна розвинути в ряд за α . Це дає апроксимацію

$$\int \dots \approx \frac{1}{\varpi}(\phi - \phi_0). \quad (3.46)$$

Отже, маємо

$$\phi - \phi_0 = t\varpi = t(\omega_2 - \omega_1) \rightarrow (\omega'_2 - \omega'_1)t + \psi_2 - \psi_1 = t(\omega_2 - \omega_1) + \phi_0 \quad (3.47)$$

або

$$\omega_2 - \omega_1 = \omega'_2 - \omega'_1. \quad (3.48)$$

Це означає, що інтервал між частотами ω'_j є таким самим, як і для ω_j .

Випадок $|\alpha| > |\varpi|$. Тут підінтегральний вираз стає розбіжним. Вилучаючи перехідні режими, розв'язок рівняння для ϕ є таким:

$$\phi = \arcsin(\varpi/\alpha) = \text{const}, \quad (3.49)$$

з якого випливає

$$\varphi_2 - \varphi_1 = (\omega'_2 - \omega'_1)t + \psi_2 - \psi_1 = \text{const}, \quad (3.50)$$

або

$$\omega'_2 = \omega'_1. \quad (3.51)$$

Тобто перенормовані частоти стають однаковими, відбувається затягування частот. Аналогічною є поведінка фаз.

3.4 Біфуркація з граничного циклу

Зміна значення керуючого параметра може призвести до нестійкості граничного циклу. Для аналізу такої ситуації слід узагальнити метод аналізу за лінійним наближенням (3.8), оскільки $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0(t)$, тому $\widehat{L} = \widehat{L}(t)$ — матриця з періодичними елементами, тобто $L(t + t_0) = L(t)$.

Лінійне рівняння з періодичним коефіцієнтом. Розглянемо рівняння типу

$$\dot{x} = \alpha(t)x, \quad \alpha(t + t_0) = \alpha(t). \quad (3.52)$$

Його розв'язок набуває вигляду

$$x(t) = x(0) \exp \left[\int_0^t \alpha(t') dt' \right]. \quad (3.53)$$

Якщо коефіцієнт $\alpha(t)$ періодичний (із періодом t_0), неперервно диференційований, то його можна розвинути в ряд Фур'є

$$\alpha(t) = c_0 + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}} c_n e^{in\omega t}. \quad (3.54)$$

Оскільки

$$\int_0^t \alpha(t') dt' = c_0 t + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}} \frac{c_n}{in\omega} (e^{in\omega t} - 1), \quad (3.55)$$

то інтеграл є періодичною функцією, і стійкість системи визначається лише складовою c_0 . У результаті розв'язок рівняння набуває вигляду

$$x(t) = e^{\lambda t} u(t), \quad \lambda \equiv c_0, \quad (3.56)$$

$$u(t) = x(0) \exp \left[\sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}} \frac{c_n}{in\omega} (e^{in\omega t} - 1) \right]. \quad (3.57)$$

Теоретико-груповий підхід. Розглянемо теоретико-груповий підхід до розв'язання цього рівняння. Нехай існує перетворення

$$t \rightarrow t \rightarrow t_0 \quad \text{таке, що} \quad \alpha(t + t_0) = \alpha(t). \quad (3.58)$$

Якщо піддати такому перетворенню диференціальне рівняння, то одержуємо

$$\dot{x}(t + t_0) = \alpha(t)x(t + t_0). \quad (3.59)$$

Проведемо заміну змінних $x'(t) = x(t + t_0)$. З теорії лінійних диференціальних рівнянь відомо, що існує єдиний розв'язок рівняння з точністю до сталого множника a , тоді одержуємо зв'язок

$$x'(t) = ax(t), \quad x(t + t_0) = ax(t). \quad (3.60)$$

Покажемо, що цей зв'язок дозволяє побудувати розв'язок еволюційного рівняння.

Нехай існує оператор зміщення, такий, що

$$\widehat{T}f(t) = f(t + t_0). \quad (3.61)$$

Для його визначення скористаємось розвиненням у ряд функції $f(t + t_0)$:

$$f(t + t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t_0^n}{n!} f^{(n)}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t_0^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} f(t) = e^{t_0 \frac{d}{dt}} f(t) \equiv \widehat{T}f(t). \quad (3.62)$$

Враховуючи інваріантність періодичного коефіцієнта $\alpha(t)$, одержуємо

$$\widehat{T}\alpha(t)x(t) = \alpha(t + t_0)x(t + t_0) = \alpha(t)\widehat{T}x(t). \quad (3.63)$$

Оскільки це співвідношення справедливе для довільної функції $x(t)$, то

$$\widehat{T}\alpha(t) = \alpha(t)\widehat{T}. \quad (3.64)$$

Таким чином, із зв'язка x' та x випливає

$$\widehat{T}x = ax, \quad (3.65)$$

де a — власне значення оператора \widehat{T} ; x — його власна функція. Операції \widehat{T}^n

Таблиця 3.1 — Властивості оператора \widehat{T}

Зміщення	Оператор	Дія оператора
$t \rightarrow t + t_0$	\widehat{T}	$\widehat{T}\alpha(t) = \alpha(t + t_0)$
$t \rightarrow t + nt_0$	\widehat{T}^n	$\widehat{T}^n\alpha(t) = \alpha(t + nt_0)$
$t \rightarrow t - t_0$	\widehat{T}^{-1}	$\widehat{T}^{-1}\alpha(t) = \alpha(t - t_0)$
$t \rightarrow t - nt_0$	\widehat{T}^{-n}	$\widehat{T}^{-n}\alpha(t) = \alpha(t - nt_0)$
$t \rightarrow t$	$\widehat{T}^0 \equiv \widehat{E} = 1$	$\widehat{T}^0\alpha(t) = \alpha(t)$

($n < 0, n = 0, n > 0$) створюють групу перетворень, оскільки задовольняють такі аксіоми:

- добуток двох операторів дає новий оператор із тими ж властивостями: $\widehat{T}^m\widehat{T}^n = \widehat{T}^{m+n}$;
- існує одиничний оператор $\widehat{E} = \widehat{T}^0$;
- існує обернений оператор $\widehat{T}^n\widehat{T}^{-n} = \widehat{E}$;

- груповий добуток є асоціативним: $\widehat{T}^l(\widehat{T}^n\widehat{T}^m) = \widehat{T}^n(\widehat{T}^l\widehat{T}^m)$.

У даному випадку оператори є комутативними, тобто $\widehat{T}^n\widehat{T}^m = \widehat{T}^m\widehat{T}^n$ — група абелева. Оскільки всі елементи створюються як ступені оператора \widehat{T} , то \widehat{T} — генератор групи.

Після n — кратної дії \widehat{T} маємо рівняння для $x(t)$

$$\widehat{T}^n x(t) = a^n x(t) \rightarrow x(t + nt_0) = a^n x(t). \quad (3.66)$$

Для його розв'язку припустимо, що

$$x(t) = e^{\lambda t} u(t), \quad (3.67)$$

де $u(t)$ — довільна функція. Підставляючи цей розв'язок у рівняння (3.66), одержуємо

$$e^{n\lambda t_0} u(t + nt_0) = a^n u(t). \quad (3.68)$$

Нехай $a = \exp(\lambda t_0)$, тоді маємо

$$u(t + nt_0) = u(t). \quad (3.69)$$

Таким чином, функція $u(t)$ — періодична.

Система лінійних рівнянь. Систему лінійних рівнянь із періодичними коефіцієнтами подамо у вигляді

$$\dot{\mathbf{x}} = \widehat{L}(t)\mathbf{x}, \quad (3.70)$$

де $\widehat{L}(t)$ — матриця з періодичними коефіцієнтами й інваріантна відносно дії оператора зміщення

$$\widehat{T}: t \rightarrow t + t_0, \quad (3.71)$$

що приводить до комутаційного співвідношення

$$\widehat{T}\widehat{L} = \widehat{L}\widehat{T}. \quad (3.72)$$

Діючи оператором на систему рівнянь

$$\dot{\widehat{Q}} = \widehat{L}\widehat{Q}, \quad (3.73)$$

де \widehat{Q} — матриця, одержуємо

$$(\widehat{T}\dot{\widehat{Q}}) = \widehat{L}(\widehat{T}\widehat{Q}). \quad (3.74)$$

Матриця—розв’язок визначається за допомогою сталої матриці \widehat{A} :

$$\widehat{T}\widehat{Q} \equiv \widehat{Q}(t + t_0) = \widehat{Q}(t)\widehat{A}. \quad (3.75)$$

Якщо вибрати $\widehat{Q}(0)$ у вигляді одиничної матриці, то при $t = t_0$ одержуємо $\widehat{A} = \widehat{Q}(t_0)$, тобто матриця \widehat{A} є відомою. Їй завжди можна поставити у відповідність матрицю $\widehat{\Lambda}$:

$$e^{\widehat{\Lambda}t_0} \equiv \widehat{A}. \quad (3.76)$$

Для розв’язку деформованого рівняння припустимо, що

$$\widehat{Q}(t) = \widehat{U}(t)e^{\widehat{\Lambda}t}, \quad (3.77)$$

що дозволяє записати

$$\widehat{U}(t + t_0) \exp[\widehat{\Lambda}(t + t_0)] = \widehat{U}(t)e^{\widehat{\Lambda}t}\widehat{A}. \quad (3.78)$$

В результаті маємо

$$\widehat{U}(t + t_0) = \widehat{U}(t). \quad (3.79)$$

Тобто матриця $\widehat{U}(t)$ складається з періодичних елементів.

За аналогією з рівнянням із постійними коефіцієнтами маємо розв’язок у вигляді

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(i)}(t) &= e^{\lambda_i t} \mathbf{v}^{(i)}(t), \\ \mathbf{v}^{(i)}(t) &= \sum_{j=0}^{m_i} \mathbf{v}_j^{(i)} t^j. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Характеристичні показники λ_i (*показники Флоке*) є власними значеннями матриці $\widehat{\Lambda}$.

Якщо дійсний показник Флоке λ стає позитивним, то старий граничний цикл може розпастися на нові граничні цикли. З іншого боку, якщо дійсна частина комплексного показника стає позитивною, то новий граничний цикл накладається на старий (квазіперіодичний рух — рух по тору). Утрата стійкості може супроводжуватися подвоєнням періоду, коли період нових коливань стає вдвічі більшим за старий період (подвоєння періоду, або генерація субгармоніки).

3.4.1 Подвоєння періоду

Розглянемо систему, що описується таким рівнянням еволюції:

$$\dot{x} = (\lambda + i\omega_0)x - \beta x^3 e^{-i\omega t}. \quad (3.81)$$

Розв'язок будемо шукати у вигляді

$$x(t) = y(t)e^{i\omega t/2}, \quad (3.82)$$

де y — комплексна змінна. Безпосередня підстановка цього виразу в рівняння еволюції дає

$$\dot{y} = (\lambda + i\omega_0 - i\omega/2)y - \beta y^3. \quad (3.83)$$

Це рівняння припускає наявність одного стаціонарного розв'язку $y = 0$ при $\lambda < 0$ та двох розв'язків:

$$y_0 = \pm \sqrt{\lambda + i(\omega_0 + \omega/2)/\beta} = \pm \sqrt{\alpha_0} e^{i\varphi_0/2}. \quad (3.84)$$

Одержані розв'язки є стійкими.

3.4.2 Субгармоніки

Покажемо, що подвоєння періоду є окремим випадком генерації субгармонік із частотою, що складає $1/n$ -у від частоти вихідного граничного циклу. Будемо вважати, що рівняння еволюції колективної моди має вигляд

$$\dot{x} = \lambda x - \beta x^{n+1} e^{-i\omega t}. \quad (3.85)$$

За аналогією до попереднього випадку розв'язок шукаємо у вигляді

$$x(t) = y e^{i\omega t/n}, \quad (3.86)$$

де y — стала. В результаті підстановки маємо стаціонарне рівняння

$$(\lambda - i\omega/n)y - \beta y^{n+1} = 0, \quad (3.87)$$

розв'язками якого є

$$y_0 = 0, \quad y_0^n = (\lambda - i\omega/n)/\beta = \alpha e^{i\varphi}, \quad (3.88)$$

або

$$y_0 = 0, \quad y_0 = e^{i2\pi m/n} \alpha^{1/n} e^{i\varphi/n}, \quad (3.89)$$

де m — ціле число¹. Аналіз за лінійним наближенням визначає стійкість ненульового розв'язку стаціонарного рівняння.

¹ Тут використано визначення 1 на комплексній площині: $1 = e^{i2\pi m}$, де $m = 1, 2, \dots$

Розглянемо інший випадок рівняння еволюції:

$$\dot{x} = \lambda x - \beta x^3 (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}), \quad (3.90)$$

де λ, β — дійсні параметри. У найнижчому наближенні вибираємо розв'язки у вигляді

$$x = ye^{i\omega t/2}, \quad \text{або} \quad x = ye^{-i\omega t/2}. \quad (3.91)$$

Залежно від вибраного розв'язку маємо

$$\dot{y} = (\lambda \pm i\omega/2)y - \beta y^3 (1 + e^{\pm i\varphi}), \quad (3.92)$$

при цьому виконується додаткова умова

$$\dot{\varphi} = 2\omega. \quad (3.93)$$

У випадку наявності фазових множників типу $e^{\pm i\varphi}$ використовується наближення *оберткової хвилі*. Воно полягає у тому, що можна нехтувати величиною $e^{\pm i\varphi}$, де $\varphi = 2\omega t$, у порівнянні з 1.

3.4.3 Біфуркація в тор

Якщо вимірність простору стає більшою 3, то граничний цикл трансформується в тор. Його можна однозначно відобразити на площині, а також відобразити з частковим перекриттям. Кожну точку тора можна описати на площині кутів $\varphi_1, \varphi_2 \in [0, 2\pi]$. Оскільки дотична площина до тора існує в кожній точці (φ_1, φ_2) , тор — диференційовне багатотворення. Двовимірні тори дозволяють подати квазіперіодичні рухи, які відбуваються при декількох частотах водночас. Якщо використати визначення

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \sum_k \boldsymbol{\varepsilon}_k(t) = \mathbf{x}_0 + \sum_k u_k \mathbf{v}_k(t),$$

де $u(t) = re^{i\omega_k t}$, то

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \sum_k e^{i\omega_k t} \mathbf{v}_k = \mathbf{x}_0 + \sum_k [\Re\{\mathbf{v}_k\} \cos(\omega_k t) + \Im\{\mathbf{v}_k\} \sin(\omega_k t)] \quad (3.94)$$

описує рух по тору. Двовимірний тор подається вектором із двома фазами

$$\mathbf{x}(\varphi_1, \varphi_2) = \mathbf{x}(\omega_1 t, \omega_2 t).$$

Цей вектор дозволяє провести розвинення в ряд

$$\mathbf{x} = \sum_n c_n e^{i n \omega t}, \quad (3.95)$$

де $\mathbf{n}\omega = \sum_j^N n_j \omega_j$, n_j — цілі числа. Величина відношення частот ω_i/ω_j задає густину покриття тора вектор-функцією \mathbf{x} (див. рис.3.1).

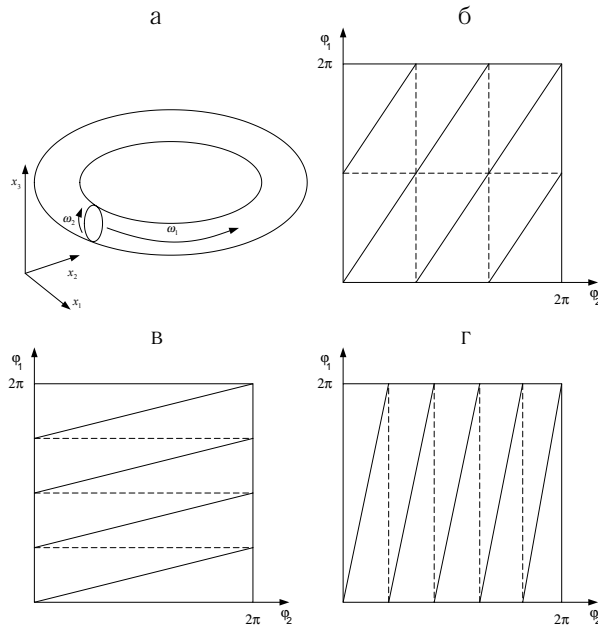


Рисунок 3.1 — Двовимірний тор (а) із локальними координатами φ_1 , φ_2 може бути однозначно поданий квадратом. Траєкторія на площині при відношенні частот $\omega_2/\omega_1 = 3/2$ (б) виходє з початкової точки $\varphi_2 = 0$, $\varphi_1 = 0$. Умова періодичності дозволяє продовжувати її після виходу за границю $\varphi_1 = 2\pi$, проєктуючи її на вісь $\varphi_2 = 0$. Аналогічно продовжуються траєкторії при виході за границю $\varphi_2 = 2\pi$, $\varphi_1 = \pi$ ми проєціюємо її у точку $\varphi_2 = 0$, $\varphi_1 = \pi$. Процедура проєціювання дає замкнуту лінію. Траєкторії на площині при відношенні частот $\omega_2/\omega_1 = 4/1$ та $\omega_2/\omega_1 = 1/5$ наведено на рисунках (в) та (г).

Розділ 4

Основи теорії катастроф [10]

Розглянемо нелінійну систему, що виходить на стаціонарний режим після взаємодії із середовищем. У випадку незмінного середовища стаціонарні стани системи повністю визначаються нулями правої частини рівняння еволюції

$$\frac{dx}{dt} = f(x; \alpha), \quad (4.1)$$

де α — параметр середовища. Далі вважається, що система є стійкою, тобто існує стала $C(\alpha) < \infty$, для якої

$$\forall t : |x(t)| < C(\alpha). \quad (4.2)$$

Нерівність існує за умови, що існує стала $K > 0$, причому

$$\begin{aligned} f(x; \alpha) < 0 & \quad \text{при всіх } x > K, \\ f(x; \alpha) > 0 & \quad \text{при всіх } x < -K. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Якщо змінна x набуває лише позитивних значень, то необхідно виконання умови

$$f(0; \alpha) \geq 0 \quad \text{при всіх } \alpha. \quad (4.4)$$

Розв'язок диференціального рівняння першого порядку є монотонною функцією, так що швидкість \dot{x} набуває одного певного значення. Тому нерівність (4.2) передбачає наявність хоча б одного стійкого стану. Якщо розв'язок рівняння (4.1) допускає більше одного стаціонарного стану, то стійкі та нестійкі стани мають чергуватися. Якщо система є градієнтною, то стаціонарні стани визначаються екстремумами потенціалу $V(x)$, де $V(x) = -\int f(x')dx'$.

4.1 Зведення до градієнтної форми

Багато автономних динамічних систем можна звести до градієнтних, саме для градієнтних систем існує достатньо простий спосіб дослідження якісних змін, що в них відбуваються у порівнянні з динамічними системами. Однак у широкому класі моделей

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x; \alpha)$$

сили $f_i(x; \alpha)$ взагалі неможливо пов'язати з будь-яким потенціалом. З'ясуємо критерій, за яким динамічну систему можна звести до градієнтної.

Для градієнтної системи

$$f_i \equiv -V_i = -\frac{\partial V(x; \alpha)}{\partial x_i}, \quad (4.5)$$

а тому

$$f_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \equiv -V_{ij} = -\frac{\partial^2 V(x; \alpha)}{\partial x_i \partial x_j} = -\frac{\partial^2 V(x; \alpha)}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial f_j}{\partial x_i} = f_{ji}. \quad (4.6)$$

Таким чином, для градієнтних систем узагальнений вихор дорівнює нулю:

$$(\text{rot} f)_{ij} = \frac{\partial f_j}{\partial x_i} - \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = 0. \quad (4.7)$$

4.2 Характер потенціальних функцій

Якщо система перебуває у стані рівноваги, то $\partial V / \partial x_i = 0$. Тип рівноваги визначається матрицею $V_{ij} = \partial^2 V / \partial x_i \partial x_j$. Якщо $\det |\partial^2 V / \partial x_i \partial x_j| \neq 0$, то поблизу точки рівноваги потенціальна функція подається у вигляді

$$V \doteq \sum_i \lambda_i^n y_i^2(x_i), \quad (4.8)$$

де λ_i — власні значення матриці стійкості V_{ij} , обчислені за умови рівноваги.

Якщо потенціальна функція залежить від одного або декількох керуючих параметрів $\alpha_1, \alpha_1, \dots, \alpha_n$, то матриця стійкості та її власні значення залежать від керуючих параметрів. Тому можливою стає картина, коли декілька (l) власних значень λ_i стають тривіальними в точці $\alpha = \alpha_0$. Тоді потенціальну функцію можна подати у вигляді

$$V(x; \alpha) = \mathcal{V}_l(y_1(x; \alpha), y_2(x; \alpha), \dots, y_l(x; \alpha); \alpha) + \sum_{i=l+1}^n \lambda_i(\alpha) y_i^2(x_i). \quad (4.9)$$

У такому разі l змінних $y_1(x; \alpha), \dots, y_l(x; \alpha)$ є гладкими функціями змінних станів та керуючих параметрів. При цьому $n - l - 1$ змінних є гладкими функціями лише змінних станів. Зауважимо, що поданий ряд є справедливим лише поблизу точки $(x_0; \alpha_0)$ у просторі $\mathbb{R}^m \otimes \mathbb{R}^n$, і функція \mathcal{V}_l не має певного вигляду. Якщо провести розкладання поблизу $x = x_0$, то маємо визначення

$$V(x; \alpha) \doteq CG(l) + \sum_{i=l+1}^n \lambda_i(\alpha) y_i^2, \quad (4.10)$$

Таблиця 4.1 — Основні катастрофи

Катастрофа	Росток	Збурення
A_2	x^3	a_1x
$A_{\pm 3}$	$\pm x^4$	$a_1x + a_2x^2$
A_4	x^5	$a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$
$A_{\pm 5}$	$\pm x^6$	$a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4$
A_6	x^7	$a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5$
D_{-4}	$x^2y - y^3$	$a_1x + a_2y + a_3y^3$
D_{+4}	$x^2y + y^3$	$a_1x + a_2y + a_3y^3$

де функція $CG(l)$ має конкретний вигляд і називається *ростком катастрофи*, вона подає збурення та можливі типи взаємодії у системі. Основні ростки катастроф наведено у таблиці 4.1.

4.2.1 Збурення

Якщо функцію $\phi(x, \alpha)$ можна розвинути в ряд Тейлора поблизу фіксованої $(x_0; \alpha_0)$ точки, то збуренням буде конструкція

$$\varepsilon(x; \alpha) = \phi(x, \alpha) - \phi(x_0, \alpha_0). \quad (4.11)$$

Нехай незбуреною функцією є

$$V(x, \alpha) = \mathcal{V}(x, \alpha) + \sum_{i=l+1}^n \lambda_i x_i^2, \quad (4.12)$$

де $\lambda_i \neq 0$ ($l+1 \leq i \leq n$), а функція $\mathcal{V}(x, \alpha)$ не містить лінійних та квадратичних складових. Збурену функцію позначимо як \tilde{V} , тоді

$$\tilde{V} = V + \varepsilon = \varepsilon_i x_i + (\delta_{ij} \lambda_i + \varepsilon_{ij}) x_i x_j + V(x_1, \dots, x_l, \alpha) + O(4), \quad (4.13)$$

де $\lambda_1 = \dots = \lambda_l = 0$.

Розглянемо збурення ростка катастрофи з однією змінною типу $\pm x^n$. Кількість членів ряду збурень має бути обмеженою величиною. Дійсно, збурення не може перевищувати порядок самого ростка катастрофи за малістю значення в певній точці $x = x_0$. Належним вибором початку координат та перетворень змінних можна довести загальну формулу для збурення ростка типу $\pm x^n$. Вона має вигляд

$$\pm x^n + \varepsilon \doteq \pm x^n + \sum_{m=1}^{n-2} a_m x^m, \quad (4.14)$$

де $a_m = a_m(\varepsilon_i, \varepsilon_{ij}, \dots; \alpha_1, \dots, \alpha_k)$.



Приклад. Росток x^3

Розглянемо збурення кубічного ростка

$$\mathcal{V} = x^3.$$

Зміна керуючих параметрів приводить до збурень основної функції, причому збуренню підлягають як росток катастрофи, так і вільна (квадратична) частина потенціальної функції. Збурення може бути враховано до членів другого порядку, оскільки для кубічного члена можна ввести нову шкалу ренормалізації x :

$$x^3 + \varepsilon = x^3 + \varepsilon_0 + \varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2. \quad (4.15)$$

Зсування початку координат ($x = x' + s$) дає

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(x') + \varepsilon(x') &= a_0 + a_1 x' + a_2 x'^2 + x'^3, \\ a_0 &= \varepsilon_0 + \varepsilon_1 s + \varepsilon_2 s^2 + s^3 \\ a_1 &= \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 s + 3s^2, \\ a_2 &= \varepsilon_2 + 3s. \end{aligned}$$

Тут a_0 є несуттєвим і може бути вибрано таким, що дорівнює нулю. Аналогічно можна взяти $a_2 = 0$, вибравши відповідно значення для s , однак $a_1 = 0$ лише за умови $3\varepsilon_1 - \varepsilon_2^2 = 0$. Враховуючи канонічність форми збурень, маємо

$$x^3 + \varepsilon \rightarrow x^3 + a_1 x.$$

Якщо $a_1 = 0$, то функція $\tilde{V}(x; 0)$ має вироджену критичну точку $x = 0$; при $a_1 < 0$ функція $\tilde{V}(x; a_1)$ має дві ізольовані критичні точки (при збільшенні a_1 вони зливаються в одну $x = 0$); за умови $a_1 > 0$ критичних точок не існує.

Максимальне число ізольованих критичних точок, що визначаються збуренням ростка катастрофи, задається індексом ростка. Можна показати, що для однопараметричної катастрофи $A_k = x^{k+1}$ рівняння

$$\frac{d}{dx} \left(x^{k+1} + \sum_{j=1}^{k-1} a_j x^j \right) = 0 \quad (4.16)$$

є поліномним рівнянням степеня k і має якнайбільше k коренів.

Таким чином, при збуренні потенціальної функції у точці, де $\partial \mathcal{V} / \partial x = 0$, $\det \mathcal{V}_{ij} = 0$ змінюється:

Таблиця 4.2 — Класифікація особливих точок

Властивість	Позначення
$\partial V/\partial x_i \neq 0$	Нерівноважна точка
$\partial V/\partial x_i = 0, \det \partial^2 V/\partial x_i \partial x_j \neq 0$	Точка рівноваги
$\partial V/\partial x_i = 0, \det \partial^2 V/\partial x_i \partial x_j = 0$	Критична точка

- число точок рівноваги (k —вироджена точка розщеплюється на k ізольованих точок);
- локалізація критичних точок;
- значення функції у критичних точках.

4.2.2 Сім'я потенціальних функцій

Покажемо, що саме ростки катастроф та їх збурення відповідають за якісну перебудову системи. Для цього розглянемо сім'я типових потенціальних функцій $V(x; \alpha)$. Нехай при $\alpha = \alpha_0$ функція $V(x; \alpha_0)$ має лише ізольовані критичні точки. Покажемо, яким чином змінюється положення критичних точок при зміні керуючих параметрів $\alpha_0 \in \mathbb{R}^n$. Оскільки ізольовані критичні точки задають атрактори та басейни притягання потенціалу V , то достатньо вивчити вплив значення α_0 на топографію $V(x; \alpha_0)$. Припустимо, що при $\alpha = \alpha_0$ існує критична точка $x = x_0$. У разі зміни $\alpha_0 + \delta\alpha_0$ маємо $x_0 + \delta x_0$. Визначимо варіації δx через значення $\delta\alpha_0$. Далі скористаємось розвиванням у ряд поблизу точки (x_0, α_0) із $\mathbb{R}^m \otimes \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned}
 V(x; \alpha) &= V(x_0; \alpha_0) + V_i(x - x_0)_i + V_a(\alpha - \alpha_0)_a + \\
 &+ \frac{1}{2!} V_{ij}(x - x_0)_i (x - x_0)_j + V_{ia}(x - x_0)_i (\alpha - \alpha_0)_a + \\
 &+ \frac{1}{2!} V_{ab}(\alpha - \alpha_0)_a (\alpha - \alpha_0)_b + O(3),
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

похідні $V_i, V_a, V_{ij}, V_{ia}, V_{ab}$ беруться в точці (x_0, α_0) .

Для знаходження точки рівноваги $V(x; \alpha_0 + \delta\alpha_0)$, розташованої поблизу x_0 , візьмемо $V_i = \partial V/\partial x_i = 0$:

$$\frac{\partial V}{\partial x_i} = V_{ij}\delta(x_0)_j + V_{ia}\delta(\alpha_0)_a + O(2) = 0. \tag{4.18}$$

Для варіації за умови невинродженості V_{ij} одержуємо

$$\delta(x_0)_j = -(V^{-1})_{ji} V_{ia} \delta(\alpha_0)_a \quad (4.19)$$

або

$$\frac{\partial(x_0)_j}{\partial(\alpha_0)_a} = -(V^{-1})_{ji} V_{ia}. \quad (4.20)$$

Таким чином, при зміні керуючих параметрів змінюється положення критичних точок та значення функцій у цих точках. Зміна критичних значень відповідає зміні $\delta\alpha$ керуючих параметрів та визначається підстановкою (4.20) у (4.17):

$$V(x_0 + \delta x; \alpha_0 + \delta\alpha) = V(x_0; \alpha_0) + \delta^{(1)}V + \delta^{(2)}V + \dots, \quad (4.21)$$

$$\delta^{(1)}V = V_a \delta\alpha_a, \quad (4.22)$$

$$\delta^{(2)}V = \frac{1}{2} \delta\alpha_a [V_{ab} - V_{ai}(V^{-1})^{ij} V_{jb}] \delta\alpha_b = \frac{1}{2} g_{ab} \delta\alpha_a \delta\alpha_b. \quad (4.23)$$

Одержані рівняння визначають лінійний відгук положення ізольованих критичних точок на малі відхилення керуючих параметрів, рівняння (4.22) — лінійний відгук критичних значень на малі зміни керуючих параметрів, рівняння (4.23) — квадратичний відгук, який подається у формі метричного тензора g_{ab} .

На основі (4.20) випливає, що малі зміни керуючих параметрів приводять до незначних змін положення критичних точок. Оскільки власні значення V_{ij} у ізольованих критичних точках є гладкими функціями керуючого параметра α , малі зміни керуючих параметрів можуть викликати лише малі зміни власних значень та векторів. Тому атрактори та басейни притягання $V(x; \alpha_0 + \delta\alpha_0)$ незначно відрізняються від атракторів та басейнів $V(x; \alpha_0)$, а отже, ці функції є топографічно ідентичними. Топографія буде змінюватись якісно завдяки наявності вироджених критичних точок. Функцію можна вважати структурно стійкою, якщо при малих змінах керуючих параметрів її поведінка (число та тип атракторів, басейнів притягання та ін.) не змінюється.

4.2.3 Найпростіші катастрофи

Складка. Складка є катастрофою типу A_2 . Для неї характерним буде сім'я потенціальних функцій типу

$$\tilde{V}(x, \alpha) = \frac{1}{3} x^3 + \alpha x. \quad (4.24)$$

Як зазначалося вище, при $\alpha < 0$ маємо дві критичні точки, при $\alpha = 0$ — одну двічі вироджену, а при $\alpha > 0$ — ні однієї. Біфуркаційна множина задається

однією точкою $x = 0$. Положення критичних точок визначається розв'язком рівняння

$$\partial V / \partial x = x^2 + \alpha = 0, \quad (4.25)$$

згідно з яким

$$x_{1,2} = \pm \sqrt{-\alpha}, \quad V(x_{1,2}; \alpha) = \pm \frac{2}{3} |\alpha|^{3/2}.$$

Для матриці стійкості в цих точках маємо

$$\left. \frac{d^2 V(x; \alpha)}{dx^2} \right|_{x=\pm\sqrt{-\alpha}} = \mp 2\sqrt{|\alpha|}.$$

Зборка. Тип цієї катастрофи — A_3 . Потенціальна функція тепер залежить від двох параметрів α та b :

$$\tilde{V}(x; \alpha, b) = \frac{1}{4} x^4 + \frac{\alpha}{2} x^2 + bx. \quad (4.26)$$

Критичні, двічі вироджені критичні та тричі вироджені критичні точки катастрофи A_3 визначаються рівністю нулю похідних першого, другого та третього порядку:

$$x^3 + \alpha x + b = 0, \quad (4.27)$$

$$3x^2 + \alpha = 0, \quad (4.28)$$

$$6x = 0. \quad (4.29)$$

Рівняння (4.27) задає критичні точки; умови (4.27), (4.28) виконуються у двічі вироджених точках; (4.27) — (4.29) — у тричі вироджених точках.

Положення точки, що визначає функцію з тричі виродженою критичною точкою, визначається як $x = 0$, $\alpha = 0$, $b = 0$. Тоді $\tilde{V}(x; 0, 0) = x^4/4$ — функція із тричі виродженою критичною точкою на початку координат.

Точки простору керуючих параметрів, що параметризують функції із двічі виродженими критичними точками, визначаються як $\alpha = -3x^2$, $b = 2x^3$. Якщо положення цієї точки позначити через x^c , то одержуємо зв'язок між α та b , що визначає функцію із двічі виродженою критичною точкою. Виражаючи x^c через α та b , маємо

$$\left(\frac{\alpha}{3}\right)^3 + \left(\frac{b}{2}\right)^2 = 0. \quad (4.30)$$

Це рівняння описує лінії складки, що зображено на рис.4.1 У різних областях простору параметрів, обмежених сепаратрисами, потенціальна функція

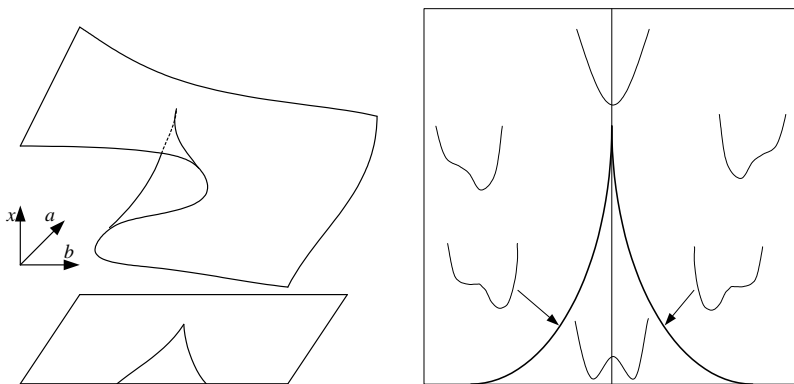


Рисунок 4.1 — Сепаратиси катастрофи зборки

має один або два максимуми з порушеною симетрією; на лініях складки потенціальна функція випробує перегин.

Зауважимо, що система є інваріантною при такому масштабуванні:

$$x \rightarrow \lambda x, \quad \alpha \rightarrow \lambda^2 \alpha, \quad b \rightarrow \lambda^3 b, \quad \tilde{V} \rightarrow \lambda^4 \tilde{V}. \quad (4.31)$$

4.3 Поняття та принципи теорії фазових переходів

Стан системи, що керується потенціалом $V(x, \alpha)$, описується точкою, в якій потенціал набуває мінімального значення. Зміна зовнішніх умов приводить до зміни керуючих параметрів, що позначається на вигляді $V(x, \alpha)$: глобальний мінімум, що визначав стан системи, може стати метастабільним локальним мінімумом або взагалі зникнути, перетворившись на максимум. У цьому випадку система «перескочить» з одного локального мінімуму в інший. Момент переходу та мінімум, в якому стан системи буде стійким, визначаються у відповідності до теорії катастроф.

Принцип максимального зволікання — стан системи визначається стійким (стабільним) або метастабільним мінімумом до тих пір, поки він існує. Цей принцип використовується при описі градієнтних динамічних систем

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{d}{dx}V(x; \alpha) \quad \text{за умови} \quad \frac{d\alpha}{dt} \ll 1.$$

Це пояснюється тим, що потенціальна функція змінюється дуже повільно і не

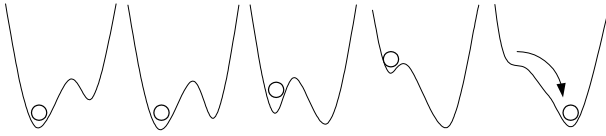


Рисунок 4.2 — Принцип максимального зволікання

існує способу визначення глобального стійкого мінімуму. Якщо існує локально стійкий мінімум у точці $(x_0(\alpha(t), \alpha(t)))$, то $dx_0/dt = 0$ залишається умовою рівноваги, доки потенціал є стійким у точці x_0 . Тільки тоді система може досягнути нового локального мінімуму.

Принцип Максвелла — стан системи визначається глобальним мінімумом потенціалу. Цей підхід використовується, коли є необхідна інформація про рі-

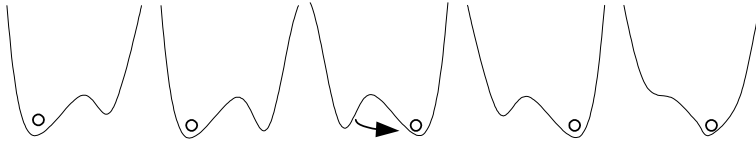


Рисунок 4.3 — Принцип Максвелла

вень випадкових збурень (флуктуацій), що здатні перевести систему через потенціальний бар'єр. Якщо їх інтенсивність є малою, то система не здатна перейти в інший мінімум потенціалу. Якщо ця інтенсивність достатня для організації переходу, то система переходить у найглибший мінімум. У разі коли система знаходиться лише у глобальному мінімумі потенціалу (до та після переходу), то вона є «рівноважною» — система перебуває у стані з найменшою енергією.

Стан системи визначається взаємодією між динамікою системи та зовнішніми флуктуаціями. Перехід з одного локального мінімуму в інший називається *фазовим переходом*. Фазові переходи відповідають якісним змінам властивостей системи. За наявності шуму малі флуктуації можуть впливати лише локально так, що віддалені мінімуми не знаходяться (принцип максимального зволікання, див. рис. 4.2). Великі флуктуації, що приводять до перекидання системи у глибші долини, забезпечують виконання принципу Максвелла (див. рис. 4.3). *Фазою* називають стан системи, який може перебувати у рівновазі з іншими, які відрізняються за своїми властивостями, станами, причому в такому разі фази розділено межами.

При фазовому переході система може упорядковуватися або розупорядковуватися. Результатом першого є наявність упорядкованої фази, де параметр порядку відрізняється від нуля. Неупорядкованій фазі відповідає нульове значення параметра порядку. Упорядкована фаза характеризується зменшенням симетрії системи (створення кристалічної ґратки при затвердінні — виникнення напрямлень симетрії), неупорядкована, навпаки, має більшу симетрію (газ молекул, для якого не виділяється фіксованих напрямків руху, тощо). Тому упорядкована фаза є несиметричною, а неупорядкована — симетричною.

4.3.1 Індикатори катастроф

У прикладних задачах не завжди стає можливим виявити критичні точки відразу, через те, наприклад, що потенціальна функція є доволі складною, або точно не відома, інший випадок, коли система не є градієнтною, або взагалі невідомо рівняння еволюції системи. Однак наявність катастрофи можна виявити за певними п'ятьма основними індикаторами. Якщо хоча б один із них зафіксовано, то керуючі параметри можна змінювати так, щоб можливим стало виявлення інших ознак катастрофи. Якщо встановлено наявність катастрофи та її тип, то можна визначити:

- спрощену модельну потенціальну функцію;
- відповідний росток катастрофи, що дозволить встановити тип фізичного процесу;
- відповідний тип еволюційних рівнянь (динамічний, дифузійний та ін.).

Основні індикатори катастроф подано нижче.

Модальність. Фізична система може перебувати у двох або більшій кількості фізичних станів (потенціальна функція повинна мати більше одного мінімуму у певній області керуючих параметрів).

Недосяжність. Якщо система перебуває в стані рівноваги, яка є сідлом, то такий стан є нестійким, оскільки існують інфінітезимальні збурення, які приводять до зменшення значення потенціалу. Якщо потенціал має більше одного локального мінімуму, то має бути одне сідло — стан нестійкої рівноваги.

Катастрофічні стрибки. Незначна зміна керуючих параметрів системи приводить до сильних змін (катастрофічних стрибків) у значеннях змінних стану. За принципом Максвелла такий стрибок супроводжується плавною зміною значення потенціалу, але такою, що похідна від потенціалу випробовує розрив. У разі використання принципу максимального зволікання стрибок з одного зникаючого локального мінімуму в глобальний або в інший локальний супроводжується дискретною зміною значення потенціалу.

Розбіжність. У стані рівноваги кінцевим змінам керуючих параметрів відповідають кінцеві зміни значень змінних стану. Поблизу критичної точки невеликі зміни початкових значень змінних стану приводять до великих змін кінцевих значень цих змінних. Нестійкість фізичного процесу при збуреннях у траєкторії керуючих параметрів називається *розбіжністю*.

Гістерезис. Гістерезис має місце, коли фізичний процес не є повністю оборотним (стрибок із мінімуму 1 у мінімум 2 відбувається, а стрибок із 2 в 1 — ні). Гістерезис не спостерігається, якщо прийнято принцип Максвелла.

Розбіжність лінійного відгуку. При незначних відхиленнях від точки рівноваги (x_0, α_0) потенціальну функцію можна розвинути в ряд за степенями $(x - x_0)$, $(\alpha - \alpha_0)$, що дає вираз для лінійного відгуку

$$\delta(x_0)_j = -(V^{-1})^{jk} V_{ka} \delta(\alpha_0)_a = \chi_{ja}(x_0; \alpha_0) \delta(\alpha_0)_a, \quad (4.32)$$

де χ_{ja} — тензор сприйнятливості, який виражає відгук $\delta(x_0)_j$ на зміну $\delta(\alpha_0)_a$, він виражається через другі похідні потенціалу, узяті у точці рівноваги. При наближенні до критичної точки ($\det V_{ij} \rightarrow 0$) у матриці V^{-1} деякі елементи стають надто великими. Таким чином, сприйнятливість у критичній точці розбігається.

Критичне уповільнення. Нехай для градієнтної системи

$$\frac{dx_i}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

існує стан рівноваги $(x_0; \alpha_0)$. Тоді

$$V(x; \alpha) = const + \frac{1}{2} \delta x_i \delta x_j V_{ij} + O(3).$$

Лінеаризація еволюційного рівняння дає можливість встановити часову асимптотику $\delta x_i \propto e^{\lambda_i t}$, λ_i — власні значення матриці V_{ij} . При підході до критичної

точки $\det V_{ij} \rightarrow 0$, а тому релаксація системи до стану рівноваги уповільнюється, тобто відбувається *критичне уповільнення*.

4.3.2 Класифікація фазових переходів

Для опису фізичної системи вводиться сім'я потенціальних функцій, залежних від m змінних стану (*параметрів порядку* $x \in \mathbb{R}^m$) та n керуючих параметрів $\alpha \in \mathbb{R}^n$. Стани системи описуються значенням x_0 , що мінімізує потенціал. Тоді дослідження системи зводиться до вивчення рівноваги та локальної стійкості потенціальної функції $V(x, \alpha)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x_i} &= 0 \quad \text{— рівновага,} \\ \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} &> 0 \quad \text{— локальна стійкість,} \end{aligned} \tag{4.33}$$

та критичних значень на гілках стійкої рівноваги.

Практично для всіх $\alpha \in \mathbb{R}^n$ потенціальна функція буде характеризуватись лише ізольованими критичними точками $x_0^{(i)}$. Перше з наведених рівнянь (4.33) використовується для визначення положення ізольованих точок як залежностей від керуючих параметрів:

$$x_0^{(i)} = x_0^{(i)}(\alpha).$$

Друге рівняння (4.33) дозволяє встановити локальну стійкість у точці $(x_0^{(i)}(\alpha), \alpha)$. Фазовий перехід відбувається, коли точка $(x \in \mathbb{R}^m)$, що описує стан системи, переходить з однієї критичної гілки на іншу.

Фазові переходи можуть відбуватися при зміні значень керуючих параметрів. Узагалі вважається, що керуючий параметр залежить від одного параметра, і саме цей параметр використовується для опису кривої фазового переходу у просторі керуючих параметрів:

$$\begin{aligned} \alpha_j &\rightarrow \alpha_j(\tau), \quad \tau \in \mathbb{R}^1, \\ x_0^{(i)}(\alpha_j) &\rightarrow x_0^{(i)}(\alpha_j(\tau)) \rightarrow x_0^{(i)}(\tau), \\ V^{(i)}(x_0^{(i)}(\alpha_j), \alpha_j) &\rightarrow V^{(i)}(x_0^{(i)}(\tau), \alpha_j(\tau)) \rightarrow V^{(i)}(\tau). \end{aligned}$$

Множина точок у просторі керуючих параметрів, у яких відбувається фазовий перехід, називається *біфуркаційною множиною*. Компоненти біфуркаційної множини, що обмежують її область, утворюють фазову діаграму, на якій різні

фази розділено кривими упорядкування та співіснування фаз. Згідно з принципом максимального зволікання фазові переходи відбуваються, коли крива $\alpha_j(\tau)$ перетинає компоненту біфуркаційної множини, на якій виникають та зникають локальні мінімуми потенціалу. Згідно з принципом Максвелла фазовий перехід має місце, коли крива рівноваги перетинає компоненту біфуркаційної множини, на якій не менше двох глобальних мінімумів є виродженими.

Фазові переходи описуються класифікацією Еренфеста. Нехай фазовий перехід відбувається внаслідок перескоку стану системи з i -ої критичної гілки на j -у при $\alpha_k(\tau^0)$, коли $\tau \rightarrow \tau^0$. У такому разі маємо фазовий перехід p -го роду, якщо:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d^k}{d\tau^k} V^{(i)}(\tau) \Big|_{\tau^0 - \epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d^k}{d\tau^k} V^{(i)}(\tau) \Big|_{\tau^0 + \epsilon}, \quad k = 0, 1, \dots, p-1, \quad (4.34)$$

і це рівняння не виконується при $k = p$.

Фазовий перехід називається *локальним (м'яким)*, якщо

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [x_0^{(i)}(\tau - \epsilon) - x_0^{(i)}(\tau + \epsilon)] = 0. \quad (4.35)$$

У протилежному випадку перехід називається *нелокальним (жорстким)*. У фізичних системах фазові переходи мають нульовий, перший та другий рід.

Розділ 5

Теорія фазових переходів

У термодинаміці фазові переходи описуються на мові термодинамічних потенціалів, де роль керуючих параметрів виконують термодинамічні величини: T — температура, S — ентропія, V — об'єм, P — тиск. До таких потенціалів відносять:

- внутрішню енергію системи $U = U(S, V)$;
- вільну енергію (вільну енергію Гельмгольца) $F(T, V)$;
- термодинамічний потенціал (вільну енергію Гіббса) $\Phi(T, P)$;
- теплову функцію $W(S, P)$.

Зв'язок між цими потенціалами є таким:

$$\begin{aligned} dU &= TdS - PdV, & dF &= -SdT - PdV, \\ d\Phi &= -SdT + VdP, & dW &= TdS + VdP. \end{aligned}$$

5.1 Модель Гінзбурга–Ландау [7]

Для опису фазових переходів використовують розвинення потенціалу в ряд за степенями параметра порядку. Вигляд такого розвинення відповідає симетрії задачі, що дозволяє звести можливий вигляд потенціалу до класу парних функцій за параметром порядку. В багатьох випадках форма потенціалу відповідає росткам катастроф та їх збуренням. Одним із прикладів такого розвинення вільної енергії є конструкція

$$F = F_0 + \frac{A}{2}x^2 + \frac{B}{4}x^4 + \frac{C}{6}x^6, \quad (5.1)$$

де керуючі параметри A , B , C є плавними функціями температури. Залежно від значень температурних коефіцієнтів зміна вільної енергії $\Delta F = F - F_0$ може набувати вигляду, наведеного на рис.5.1. Потенціал (5.1) визначає модель Гінзбурга–Ландау. З рисунка видно, що рівноважний стан системи (мінімум) буде характеризуватися різними значеннями параметра порядку.

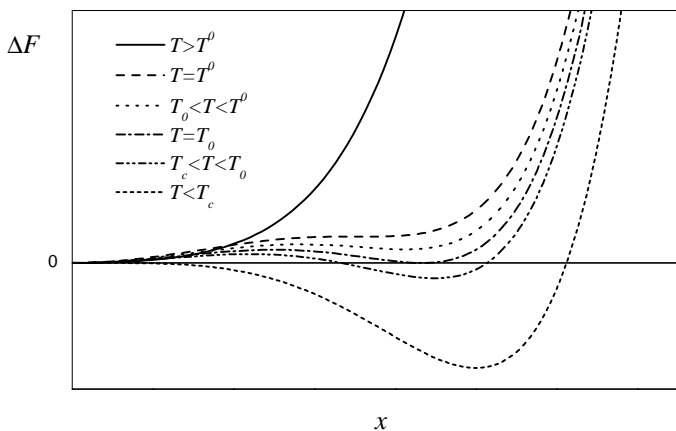


Рисунок 5.1 — Залежність зміни вільної енергії від параметра порядку при різних значеннях температури

5.1.1 Перехід другого роду

Фазові переходи другого роду описуються моделлю Гінзбурга–Ландау з потенціалом, що відповідає катастрофі A_3 :

$$F(x) = F_0 + \frac{A}{2}x^2 + \frac{B(T, V)}{4}x^4, \quad A = a(T - T_c). \quad (5.2)$$

Еволюція системи, що описується цим потенціалом, визначається рівнянням

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{dF}{dx}. \quad (5.3)$$

За умови перенормування $x' = x/B^{1/3}$, $t' = tB^{1/3}$, $\alpha = a(T - T_c)/B^{1/3}$ еволюційне рівняння буде задаватися потенціалом

$$V = \frac{\alpha}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4, \quad (5.4)$$

де штрих опущено. Умова рівноваги зводиться до стаціонарного рівняння $\dot{x} = 0$ і дає

$$\frac{dV}{dx} = x(\alpha + x^2) = 0, \quad x_0^{(1)} = 0, \quad x_0^{(2)} = \pm\sqrt{-\alpha} = \pm\sqrt{-a(T - T_c)/B^{1/3}}.$$

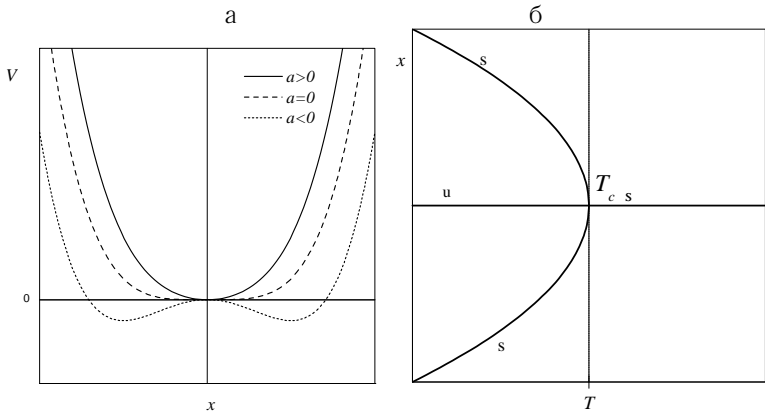


Рисунок 5.2 — Зміна форми потенціалу із зміною керуючого параметра α (а). Біфуркація (б) при зміні температури (s, u — стійкі та нестійкі стани)

Стійкість розв’язків задається другою похідною. Стійкість розв’язку $x_0 = 0$ визначається умовою $\alpha > 0$. Ненульові розв’язки стають стійкими за умови $\alpha < 0$. Тому нульовий розв’язок стає нестійким, а ненульові — стійкими (біфуркація подвоєння). Поблизу критичного значення температури T_c маємо залежність типу $x(T) \sim |T - T_c|^\beta$, $\beta = 1/2$.

Визначимо тип переходу за класифікацією (4.34). Зміна нульової похідної (самої функції) у різних фазах — неперервна. Обчислимо ентропію як першу похідну за температурою:

$$S = -\frac{\partial V}{\partial T} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \alpha}{\partial T} x^2.$$

При $x_0 = 0$ маємо S_0 . При $x_0 = \sqrt{-a(T - T_c)/B^{1/3}}$ одержуємо

$$S = \frac{a^2(T - T_c)}{2B^{2/3}}.$$

Таким чином, ентропія (перша похідна потенціалу) системи змінюється неперервно, тобто теплота переходу $dQ = TdS$ не змінюється. Друга похідна за температурою — теплоємність

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$$

у фазі $x_0 = 0$ має сталі значення C_{V0} , що відповідає S_0 . У точці переходу (при $T = T_c$) маємо

$$C_V = C_{V0} + \frac{T_c a^2}{2B^2/3}.$$

Таким чином, стрибок відчуває теплоємність (друга похідна), тому перехід є переходом другого роду. Для теплоємності одержуємо $C(T) \sim |T - T_c|^\alpha$, $\alpha = 0$.

5.1.2 Вплив поля

Розглянемо вплив збурення, що порушує симетрію потенціалу Гінзбурга–Ландау. Це призводить до катастрофи зборки. Фазовий перехід другого роду зникає при незначному порушенні симетрії потенціальної функції і може явитися як перехід нульового або першого роду у віддаленій точці простору параметрів. Збурення ростка катастрофи A_3 відповідає включенню зовнішнього тягнучого поля b :

$$V = \frac{\alpha}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 + bx. \quad (5.5)$$

Перехід нульового роду. Використовуючи принцип максимального зволікання, будемо рухатись по прямій 0 (див. рис.5.3). Фазовий перехід відбувається, коли зникає мінімум і система переходить із мінімуму $x_0^{(1)} = \sqrt{-\alpha/3}$ у мінімум із координатою $x_0^{(2)} = -2\sqrt{-\alpha/3}$. Значення потенціалів у цих точках є такими:

$$V^{(1)} = \alpha^2/12, \quad V^{(2)} = -2\alpha^2/3.$$

У точці \times нульова похідна випробовує стрибок

$$\Delta V = V^{(2)} - V^{(1)} = -\frac{3}{4}\alpha^2.$$

Тому перехід є фазовим переходом нульового роду, величина стрибка залежить лише від положення цієї точки на біфуркаційній множині.

Перехід першого роду. Скористаємось принципом Максвелла та будемо рухатися по прямій 1 (рис.5.3). У даному випадку біфуркаційна множина складається з напівпрямої $\alpha < 0$, $b = 0$. Перехід відбувається в точці \times , де змінна стану перестрибує з правого мінімуму $x_0^{(1)} = \sqrt{-\alpha}$ на лівий $x_0^{(2)} = -\sqrt{-\alpha}$. Тут $V^{(1)} = V^{(2)} = -\alpha^2/4$. Визначимо першу похідну

$$\frac{dV(x, \alpha(T), b(T))}{dT} = \frac{\partial V}{\partial x} \frac{dx}{dT} + \frac{\partial V}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{dT} + \frac{\partial V}{\partial b} \frac{db}{dT}$$

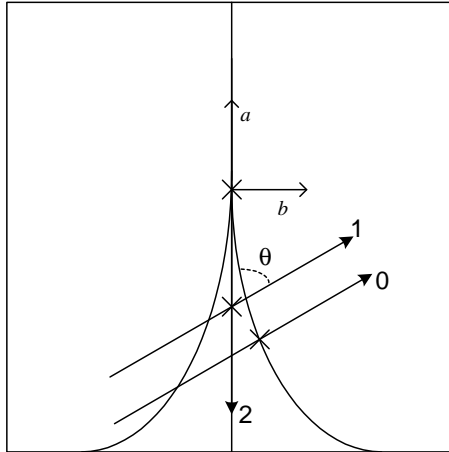


Рисунок 5.3 — Порядок фазового переходу залежить від прийнятого принципу та шляху руху. Перехід нульового роду відбувається на шляху 0, якщо справедливим є принцип максимального зволікання, перехід першого роду відбувається на шляху 1 при виконанні принципу Максвелла, перехід другого роду відбувається на шляху 2

на максвелівській множині. Рівноважний стан визначає $dV/dx = 0$; похідні $\frac{d\alpha}{dT}$ та $\frac{db}{dT}$ інтерпретуються як напрямні косинуси, тому $db/d\alpha = \frac{db/dT}{d\alpha/dT} = \text{tg } \theta$. У результаті маємо

$$\Delta \frac{dV}{dT} = \left(\frac{1}{2} x^2 \cos \theta + x \sin \theta \right)^{(2)} - \left(\frac{1}{2} x^2 \cos \theta + x \sin \theta \right)^{(1)} = -2\sqrt{-\alpha} \sin \theta.$$

Тут перша похідна розривається в критичній точці, тому маємо перехід першого роду.

Узагальнена сприйнятливість. Скористаємось визначенням тензора сприйнятливості для визначення лінійного відгуку. Згідно з (4.32) маємо

$$\chi_{ja}(x_0; \alpha_0) = -(V^{-1})^{jk} V_{ka}. \quad (5.6)$$

У нашому випадку

$$V_{xx} = 3x^2 + \alpha, \quad V_{x\alpha} = x, \quad V_{xb} = 1.$$

Тензор сприйнятливості в точці (x, α, b) визначається співвідношеннями

$$\begin{aligned} \delta x &= -\frac{1}{3x^2 + \alpha}(x, 1) \begin{pmatrix} \delta\alpha \\ \delta b \end{pmatrix}, \\ \chi_{1a} &= -\frac{1}{3x^2 + \alpha}(x, 1), \quad a = 1, 2. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Розглянемо детальніше вплив поля $h \equiv b$ для з'ясування поведінки сприйнятливості та виявлення гістерезису. Сприйнятливості визначається формулою

$$\chi = \left(\frac{\partial x}{\partial h} \right) \Big|_{h \rightarrow 0}. \quad (5.8)$$

За умови $h \neq 0$ із рівняння рівноваги

$$h = -(\alpha x + x^3)$$

маємо

$$\frac{\partial x}{\partial h} = -\frac{1}{\alpha + 3x^2}. \quad (5.9)$$

Тому

$$\chi = \begin{cases} -\frac{1}{\alpha} = -\frac{T_c}{T - T_c}, & \text{при } x_0 = 0, \\ \frac{1}{2\alpha} = \frac{T_c}{2(T - T_c)}, & \text{при } x_0 = \pm\sqrt{-\alpha}. \end{cases} \quad (5.10)$$

Одержані співвідношення для сприйнятливості виражають *закон Кюри-Вейса*, згідно з яким поблизу критичної точки (точки переходу)

$$\chi \sim |T - T_c|^{-1}, \quad (5.11)$$

при цьому сприйнятливості у різних фазах відрізняється вдвічі. З рівняння рівноваги випливає, що при малих полях виконується скейлінгове співвідношення $x \sim h^{1/\delta}$, $\delta = 3$. За наявності поля система характеризується гістерезисом. Гістерезис не виникає, коли прийнято принцип Максвелла. Рис.5.4 показує петлю гістерезису при низьких температурах. При високих температурах вона зникає. Стрілки показують поведінку системи при зменшенні поля та його збільшенні. Видно, що стрибки параметра порядку відбуваються при різних величинах поля h . На ділянках AB , A_1B_1 термодинамічний потенціал є мінімальним, але величина цього мінімуму перевищує мінімуми, що відповідають ділянкам AD , A_1D_1 . Ділянки AB , A_1B_1 задають метастабільні фази. Таким чином, рівноважний хід функції $x(h)$ задається контуром DAA_1D_1 , де всі точки відповідають глобально стійким термодинамічним станам.

З наведеного можна зробити такі висновки.

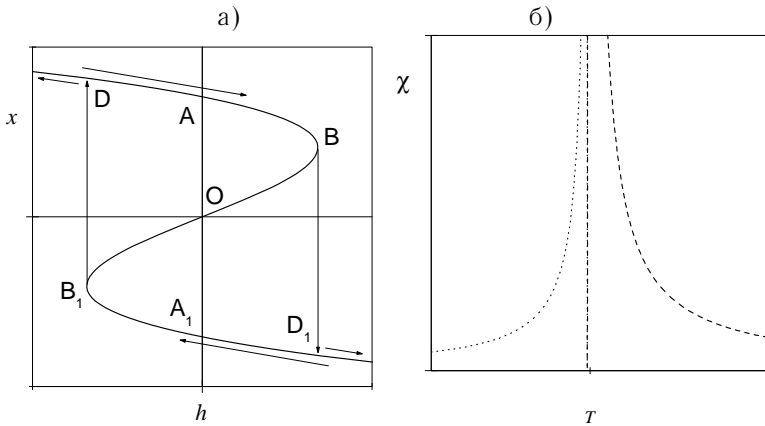


Рисунок 5.4 — Вплив поля зовнішнього поля h на фазовий перехід: а) гістерезис, що виникає при катастрофі зборки ($T < T_c$); б) сприйнятливість вище та нижче від точки фазового переходу

- 1 Фазовий перехід другого роду є локальним, у той час як переходи першого та нульового роду — нелокальні.
- 2 Фазові переходи, які не є переходами нульового, першого та другого роду, неможливо описати в рамках формалізму катастрофи зборки. Для них мають бути катастрофи більшої вимірності.
- 3 На основі принципу Максвелла біфуркаційна множина зборки складається з напівпрямої ($\alpha < 0, b \neq 0$), що відповідає переходам першого роду, та граничної точки ($\alpha = 0, b = 0$), що відповідає переходу другого роду.

5.1.3 Критична точка рідини

Прикладом застосування розвинутого формалізму є опис переходів між твердою фазою, рідиною та парою. Такі переходи відбуваються при певних температурах: сублімації (температура рівноваги твердої фази та пари); плавлення (рівновага рідини та твердої фази); кипіння (рівновага пари та рідини). Температури залежать від тиску і зображуються кривими на фазовій діаграмі (рис.5.5а). Ці криві є кривими переходів першого роду. Математичному набору параметрів (x, α, b) відповідає фізичний набір: ρ — густина речовини, P — тиск, T — температура. Математична зборка відбувається при $(x, \alpha, b) = (0, 0, 0)$, а фізична

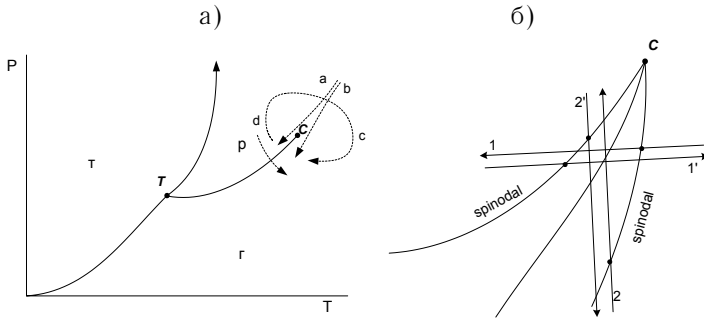


Рисунок 5.5 — Діаграма станів системи: а) фазова діаграма переходів між трьома фазами; б) лінії складки (спінодалі) поблизу критичної точки

при $(\rho, P, T) = (\rho_c, P_c, T_c)$. Знемірювання фізичних параметрів дозволяє ввести змінні:

$$x = \rho/\rho_c - 1, \quad p = P/P_c, \quad t = T/T_c.$$

Зв'язок між математичними (α, b) та фізичними $(p-1, t-1)$ задається лінійним перетворенням

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p-1 \\ t-1 \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Належний вибір умов щодо співвідношень між A, B, C, D приводить до катастрофи зборки, яка реалізується в критичній точці C , а рівняння фазової діаграми відповідає рівнянню Ван-дер-Ваальса. Наведемо ознаки катастрофи зборки поблизу точки C , де рідина та газ не відрізняються:

модальність — речовина у текучому стані бімодальна поблизу кривої рівноваги фаз рідина—газ, при цьому фази розділяються;

стрибки — невеликі зміни температури та тиску, коли точка простору проходить криву рівноваги, приводить до великих змін густини речовини;

розбіжність — слабка варіація керуючих параметрів переводить систему в різні фази. Перевести в іншу фазу можна стрибком, перетинаючи лінію рівноваги, або неперервно, обходячи точку зборки C (див. рис.5.5а);

гістерезис — якщо C — точка зборки, то вона оточується лініями складок, за якими система не є бімодальною. Ці лінії називаються *спінодалями*. Фізично вони відповідають стану перегрітої рідини та переохолодженого

газу (на рис.5.5б перехід від перегрітої рідини відповідає лініям 1, 2; від переохолодженого газу відповідає лініям 1', 2'.);

розбіжність сприйнятливості — ізотермічна стискальність $k_T = -V^{-1}(\frac{\partial V}{\partial P})_T$ має розбіжний характер;

уповільнення — із зростанням стискальності швидкість звуку $\sim k^{-1/2}$ падає до нуля;

аномальні зміни — при конденсації пари виникають краплини рідини, що осідають на дні резервуара. При кипінні бульбашки газу піднімаються вверх. При наближенні до критичної точки знизу різниця в густині фаз зникає, час падіння краплинок та піднімання бульбашок зростає, збільшуються їхні розміри, що приводить до сильного розсіювання світла — *критична опалесценція (мутність)*.

Рівняння катастрофи зборки має вигляд

$$x^3 - (Ap + Bt - A - B)x + (Cp + Dt - C - D) = 0, \quad x = (\rho - \rho_c)/\rho_c. \quad (5.13)$$

Якщо перейти до $(V_0, P_0, T) = (\rho_c/\rho, P/P_c, T/T_c)$, то маємо

$$(A - C)P_0V_0 - AP_0 + (D + C - B - A + 1)V_0 + \\ + (A + B - 3) - V_0^{-2} + 3V_0^{-1} = BT_0 + (D - B)V_0T_0. \quad (5.14)$$

Далі скористаємось такими припущеннями.

- 1 Коефіцієнт при V_0T_0 дорівнює нулю (має виконуватись рівняння ідеального газу $PV = nRT$).
- 2 Коефіцієнт при V_0 дорівнює нулю.
- 3 Вільний член дорівнює нулю.

Це дозволяє переписати лінійне перетворення коефіцієнтів у вигляді

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 - D & D \\ 2 - D & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p - 1 \\ t - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

У результаті рівняння стану

$$P_0V_0 - (3 - D)P_0 + \frac{3}{V_0} - \frac{1}{V_0^2} = DT_0 \quad (5.16)$$

перепишується у формі рівняння Ван-дер-Ваальса

$$\left(P_0 + \frac{\alpha_0}{V_0^2}\right)(V_0 - \beta_0) = DT_0, \quad D = 8/3, \quad \alpha_0 = 3, \quad \beta_0 = 1/3. \quad (5.17)$$

5.1.4 Перехід першого роду

При дослідженні переходів першого роду на відміну від x^4 -моделі використовується x^6 -модель потенціалу типу (5.1). У загальному вигляді його можна подати як

$$V = \frac{D}{6}x^6 + \frac{B}{4}x^4 + \frac{C}{3}x^3 + \frac{A}{2}x^2 + Ex. \quad (5.18)$$

Масштабування цієї функції може бути таким

$$\begin{aligned} x \rightarrow x' = \lambda x, \quad B \rightarrow B' = \lambda^2 B, \quad C \rightarrow C' = \lambda^3 C, \\ A \rightarrow A' = \lambda^4 A, \quad E \rightarrow E' = \lambda^5 E, \quad V \rightarrow V' = \lambda^6 V. \end{aligned} \quad (5.19)$$

У моделі Гінзбурга–Ландау потенціал є симетричним при $x \rightarrow -x$ і відповідає катастрофі A_{+5} . Окрім того, він має двовимірний простір керуючих параметрів $\mathbb{R}^2 = (A, B)$, $D = 1$, $C = 0$, $E = 0$.

Критична множина визначається рівнянням

$$\frac{dV}{dx} = x(x^4 + Bx^2 + A) = 0, \quad (5.20)$$

розв'язками якого є

$$x = 0, \quad x_{\pm}^2 = -\frac{B}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{B}{2}\right)^2 - A}. \quad (5.21)$$

Якщо $A < 0$, то маємо два дійсні корені різних знаків; при $0 < A < (B/2)^2$ обидва значення x^2 позитивні при $B < 0$ та негативні при $B > 0$; при $A > (B/2)^2$ дійсних коренів, окрім тривіального, не існує.

У результаті площина параметрів (A, B) розбивається на підмножини з функціями, що мають 1, 3 та 5 критичних точок. Як видно з рис.5.6, на фазовій діаграмі маємо такі катастрофи:

- зборка A_{+3} ($B > 0, A = 0$); подвійна зборка A_{-3} ($B < 0, A = 0$);
- складка $2A_2$ ($B < 0, A = (B/2)^2$);
- катастрофа A_{+5} у точці ($B = 0, A = 0$).

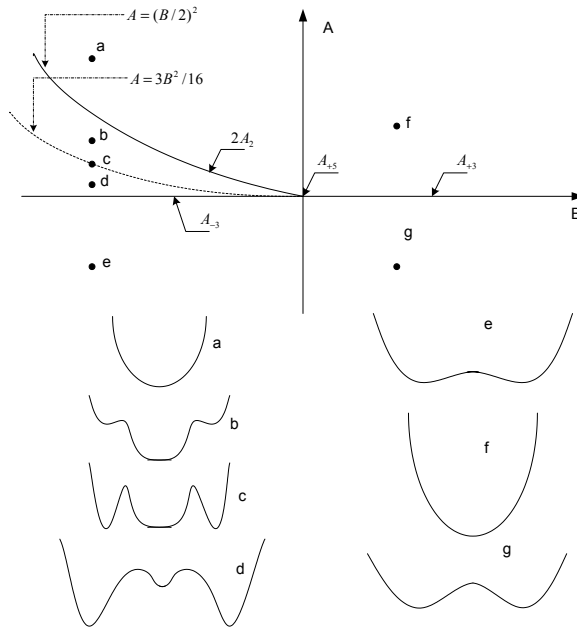


Рисунок 5.6 — Площина керуючих параметрів для симетричної катастрофи A_{+5} розбивається на три відкриті області, що відповідають функціям з одним, двома та трьома мінімумами

При переході $a \rightarrow b$ маємо дві катастрофи складки. У точці c три мінімуми мають однакову глибину, ця точка лежить на лінії співіснування фаз (*бінодали*). При переході від $d \rightarrow e$ маємо подвійну зборку, а на шляху $f \rightarrow g$ — стандартну зборку.

Три мінімуми з критичними значеннями, що дорівнюють нулю, знаходяться в точках $x_0 = 0$, $x^2 = -3B/4$. Лінія співіснування є такою:

$$B < 0, \quad A = \frac{3}{16}B^2. \tag{5.22}$$

Перехід нульового роду. За принципом максимального зволікання при перетинанні біфуркаційної лінії $A = (B/2)^2$ із $B < 0$ вздовж лінії $0a$ (рис. 5.7)

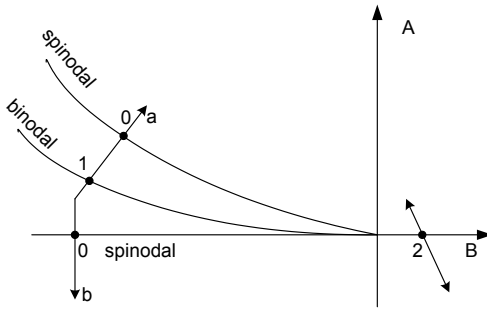


Рисунок 5.7 — Площина керуючих параметрів, що визначає тип фазового переходу

потенціал змінюється на величину

$$\Delta V = V(0; A, B) - V(\pm\sqrt{-B/2}; A, B) = -\frac{1}{6}(-B/2)^3. \quad (5.23)$$

При перетинанні напівпрямої $B < 0, A = 0$ вздовж шляху $0b$ зміна потенціалу є такою:

$$\Delta V = V(\pm\sqrt{-B}; A, 0) - V(0; A, 0) = -\frac{1}{12}(-B)^3. \quad (5.24)$$

Перехід першого роду. Фазовий перехід першого роду відбувається при перетинанні бінодалі по шляху 1 (рис. 5.7), де перша похідна потенціалу змінюється на величину

$$\begin{aligned} \Delta \frac{dV}{dT} &= - \left. \frac{dV}{dT} \right|_{0;B,A} - \left. \frac{dV}{dT} \right|_{\pm\sqrt{-3B/4};B,A} = \\ &= - \left[\frac{1}{4} \left(\frac{-3B}{4} \right)^2 \frac{dB}{dT} + \frac{1}{2} \left(\frac{-3B}{4} \right) \frac{dA}{dT} \right], \end{aligned} \quad (5.25)$$

де $dB/dT, dA/dT$ — напрямні косинуси.

Перехід другого роду. Цей перехід спостерігається, як і раніше, при катастрофі зборки при перетинанні біфуркаційної множини по шляху 2 (рис. 5.7). Тут зміна другої похідної є такою:

$$\Delta \frac{d^2V}{dT^2} = -\frac{1}{2B} \left(\frac{dA}{dT} \right). \quad (5.26)$$

Вплив поля. Вплив зовнішнього поля порушує симетрію потенціалу і є лінійним збудженням. Тоді потенціал набуває вигляду

$$V(x; A, B, h) = V(x; A, B) + hx. \quad (5.27)$$

У рамках принципу Максвелла окремий інтерес викликає положення бінодалі (лінії потрійних точок). Тут порушення симетрії зовнішнім полем може приводити до декількох фазових переходів при зміні знака h . Простір \mathbb{R}^3 керуючих параметрів зображено на рис.5.8. З рисунка видно, що фазовий перехід пер-

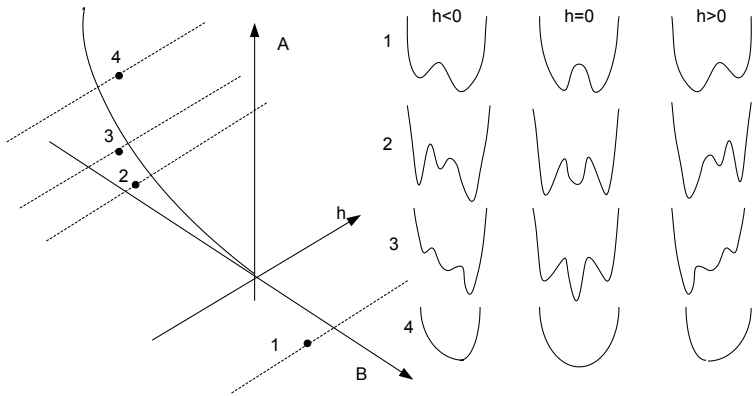


Рисунок 5.8 — Простір керуючих параметрів (A, B, h) та форми потенціалу при різних h

шого роду відбувається вздовж прямих 1 та 2, коли глобальний мінімум перестрибує з правого локального мінімуму в лівий у час, коли h , зростаючи, проходить через нуль. Два фазових переходи першого роду виникають на кривій 3, коли система переходить спочатку з правого локального мінімуму в середній при $h = -h_0$, і потім із центрального на лівий при $h = +h_0$. На прямій 4 при зміні h фазових переходів не відбувається.

5.1.5 Потрійна точка рідини

При дослідженні критичної точки рідини виявилось, що вона є ростком x^4 катастрофи зборки. Трикритична точка, що є ростком катастрофи A_{+5} , не лежить у площині фізичних параметрів (P, T) , у цій площині лежить потрійна точка, але вона не є ростком катастрофи. Таким чином, змінюючи тиск та температуру, можна потрапити лише на потрійну точку.

Для пошуку рівняння стану слід ідентифікувати математичну змінну x із фізичною (густиною) та встановити зв'язок між математичними параметрами A, B, h та фізичними P, T . Форма потенціалу для переходів тверде тіло–рідина–газ відповідає x^6 –моделі Гінзбурга–Ландау. Вигляд потенціальних функцій на діаграмі таких переходів зображено на рис.5.9.

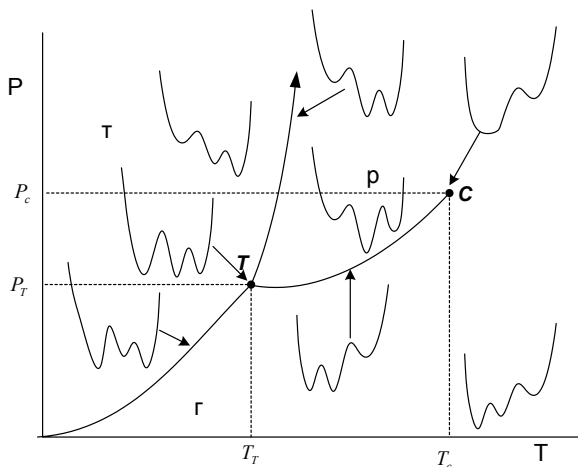


Рисунок 5.9 — Форма потенціальних функцій при переходах тверда фаза–рідина–газ

5.1.6 Критична поведінка

Згідно з теорією фазових переходів Ландау в критичній області ($T \rightarrow T_c$) фізичні величини суттєво залежать від флуктуацій, оскільки тут флуктуації стають сумірними зі значеннями самих величин. Характерно, що в цій області просторовий кореляційний радіус r_c нескінченно зростає (у випадку переходів рідина–газ настає стадія опалесценції). Тому властивості системи будуть визначатися не окремими частинками, а великими об'ємами системи, що сумірні з кореляційним радіусом. Таким чином, суттєвими стають глобальні характеристики системи. *Гіпотеза масштабної інваріантності (гіпотеза подібності)* показує, що найсуттєвіша частина взаємодії зберігає свій вигляд при переході від взаємодії окремих частинок до взаємодії областей, що містять багато частинок, із точністю до сталого множника, який залежить від співвідношення масштабів. Інакше кажучи, при переході від одних масштабів до інших характеристики системи не повинні залежати від вибору масштабів. Тоді будь-яка

фізична величина має перетворюватися за законом

$$\phi(\lambda r) = \lambda^{-\Delta} \phi(r), \quad (5.28)$$

де Δ — аномальна вимірність певної фізичної величини.

Згідно з гіпотезою подібності в критичній області всі характеристики системи набувають скейлінгового характеру. Значення деяких із них наведено у таблиці 5.1. Критичні індекси пов'язані між собою рядом точних співвідношень.

Таблиця 5.1 — Значення критичних індексів

Фізична величина	Співвідношення	Критичний індекс
Параметр порядку	$x \sim T - T_c ^\beta$	$\beta = 1/2$
	$x \sim h^{1/\delta}$	$\delta = 3$
Теплоємність	$C_P \sim T - T_c ^{-\alpha}$	$\alpha = 0$
	$C_P \sim h^{-\varepsilon}$	
Сприйнятливість	$\chi \sim T - T_c ^{-\gamma}$	$\gamma = 1$
Радіус кореляції	$r_c \sim T - T_c ^{-\nu}$	$\nu = 1/2$
	$r_c \sim h^{-\mu}$	

Так, наприклад, враховуючи співвідношення $x_{sp}(T - T_c) \sim x_{ind}(h)$, маємо

$$x_{sp}(T - T_c) \sim |T - T_c|^\beta, \quad x_{ind}(h) = \chi h \sim h|T - T_c|^{-\gamma}, \quad |T - T_c|^{\beta+\gamma} \sim h. \quad (5.29)$$

Умова, що польовий внесок у потенціал ($\sim hx$) збігається за порядком із температурним ($|T - T_c|^2 C_P$, оскільки $C = -T \partial^2 V / \partial T^2$), дає $|T - T_c|^{2-\alpha-\beta} \sim h$. Вираз для поля через температуру дає

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (5.30)$$

Скейлінгові співвідношення для параметра порядку та одержане співвідношення для поля приводять до виразу

$$\beta\delta = \beta + \gamma. \quad (5.31)$$

Аналогічно для теплоємності одержуємо

$$\varepsilon(\beta + \gamma) = \alpha. \quad (5.32)$$

Співвідношення для кореляційного радіуса приводять до зв'язку

$$\mu(\beta + \gamma) = \nu. \quad (5.33)$$

5.2 Зміна інформації при фазовому переході [6]

Оскільки самоорганізація стає можливою через фазові переходи, то покажемо, що при бифуркації система зменшує ентропію, набуваючи додаткової інформації.

Розглянемо систему з неперервним параметром порядку x , інформацію якої слід визначати як

$$I = - \int dx p(x) \ln p(x) - \ln \varepsilon, \quad (5.34)$$

де ε — величина інтервалу, що визначає похибку обчислень. Припустимо, що функція розподілу системи за станами визначається розподілом Гіббса

$$p = Z^{-1} \exp(-V(x)), \quad V(x) = -\alpha x^2 + \beta x^4. \quad (5.35)$$

Тоді величина інформації визначається формулою

$$I = \ln Z - \alpha \langle x^2 \rangle + \beta \langle x^4 \rangle - \ln \varepsilon, \quad (5.36)$$

де введено позначення для моментів [11]

$$\langle x^m \rangle = \int x^m p(x) dx. \quad (5.37)$$

Нижче порога. У цій області $\alpha < 0$, а тому істотним є квадратичний член у потенціалі (при $|\alpha| \gg 1$), тоді можна перейти до інтеграла для гаусівської функції

$$p(x) = Z^{-1} \exp(-|\alpha|x^2). \quad (5.38)$$

Умова нормування розподілу дає

$$Z^{-1} = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\pi}}. \quad (5.39)$$

Для статистичних моментів одержуємо вирази

$$|\alpha| \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}, \quad (5.40)$$

$$\beta \langle x^4 \rangle = \frac{3\beta}{(2|\alpha|)^2}. \quad (5.41)$$

За умови $|\alpha| \gg 1$ моментом четвертого порядку можна знехтувати. У результаті маємо

$$I_{<} = -\frac{1}{2} \ln |\alpha| + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \pi - \ln \varepsilon. \quad (5.42)$$

Оскільки похибка обчислень $\varepsilon \rightarrow 0$, то $-\ln \varepsilon \rightarrow \infty$. Окрім того, оскільки система знаходиться нижче порога, то $|\alpha| \rightarrow \infty$, а отже, $-\ln |\alpha| \rightarrow \infty$.

Математична конструкція інформації накладає обмеження на значення для α , ε . Величина $|\alpha|$ не може перевищувати певне значення, оскільки функція розподілу визначена на інтервалі ε , де вона суттєво відрізняється від нуля. Тобто система перебуває у певному стані лише всередині інтервалу ε . Неоднозначність фіксації значень параметра α , втрачається, якщо накласти додаткову умову для інформації, наприклад, нехай

$$I_{<} = 0. \quad (5.43)$$

Тоді впливає умова для α :

$$-\frac{1}{2} \ln |\alpha| + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \pi - \ln \varepsilon = 0. \quad (5.44)$$

Оскільки нас цікавить лише зміна інформації, то нуль інформації можна вибрати довільно, тому припустимо, що

$$I_{<} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \pi. \quad (5.45)$$

У результаті маємо співвідношення між α та ε : $|\alpha|^{1/2} = \varepsilon^{-1}$.

Вище порога. Розглянемо випадок $\alpha > 0$. За умови $\alpha \gg 1$ функцію розподілу можна апроксимувати гаусівськими функціями. Для цього скористаємось методом перевалу. Якщо синергетичний потенціал має вигляд

$$V(x) = -\alpha x^2 + \beta x^4,$$

то екстремуми функції розподілу визначаються умовою

$$\partial V / \partial x = 0 = -2\alpha x + 4\beta x^3. \quad (5.46)$$

Ненульові розв'язки цього рівняння мають вигляд

$$x_0 = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}}. \quad (5.47)$$

Виберемо знак «+». Уведемо відхилення ϵ від мінімуму потенціалу:

$$x = x_0 + \epsilon. \quad (5.48)$$

Розвинення потенціалу в ряд за відхиленнями має вигляд

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n V(x)}{\partial x^n} \right|_{x=x_0} \epsilon^n. \quad (5.49)$$

Враховуючи лише складові, що не перевищують другий порядок, одержуємо

$$p(\epsilon) = Z^{-1} \exp \left(\frac{\alpha^2}{4\beta} - 2\alpha\epsilon^2 \right). \quad (5.50)$$

Умова нормування $\int_{-\infty}^{\infty} dx p(x)$ дає

$$Z^{-1} = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \exp \left(-\frac{\alpha^2}{4\beta} \right). \quad (5.51)$$

Розглянемо випадок, коли функція розподілу має один максимум (симетрія системи порушується штучно). Інформація в такому разі визначається формулою

$$\tilde{I}_> = -\frac{1}{2} \ln \alpha - \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} \ln \pi + \frac{1}{2} - \ln \epsilon. \quad (5.52)$$

Перейдемо до випадку двох максимумів функції розподілу. Зрозумію, що тепер система може перебувати у двох рівноймовірних станах і тому зберігає інформацію 1 біт (нат). Умова нормування розподілу має вигляд

$$Z^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-V(x)} dx = 1. \quad (5.53)$$

Оскільки максимуми розташовуються симетрично відносно початку координат, то інтегрування за віссю x замінюється подвоєним інтегруванням за напіввіссю $x > 0$:

$$2Z^{-1} \int_0^{\infty} e^{-V(x)} dx = 1. \quad (5.54)$$

За умови швидкого спадання підінтегральної функції й способу обчислення інтеграла за одним максимумом слід врахувати інший максимум. Це означає, що ми вправі замінити нижню границю інтегрування на $-\infty$, тобто

$$\int_0^{\infty} \dots dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} \dots dx. \quad (5.55)$$

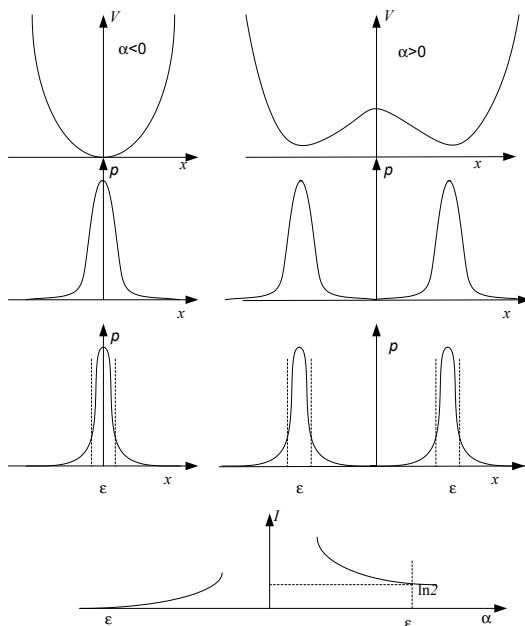


Рисунок 5.10 — Поведінка потенціальної функції, функції розподілу від x при різних нижче та вище порогу біфуркації

Таким чином, ефективна умова нормування має вигляд

$$2Z^{-1} \exp\left(\frac{\alpha^2}{4\beta}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2\alpha\epsilon^2) dx = 1 \tag{5.56}$$

і задає вигляд сталої нормування

$$Z^{-1} = \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4\beta}\right) \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} = \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4\beta}\right) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}. \tag{5.57}$$

Відповідно для другого моменту маємо

$$\langle x^2 \rangle = 2 \int_{-\infty}^{\infty} p(x)x^2 dx = \frac{1}{4\alpha}. \tag{5.58}$$

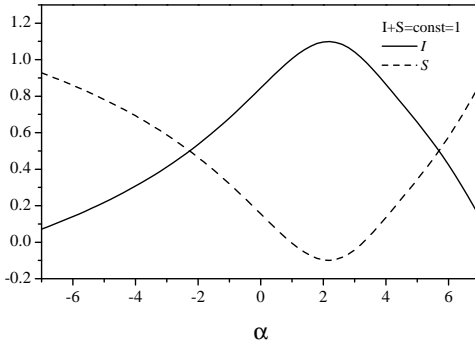


Рисунок 5.11 — Поведінка інформації та ентропії при зміні керуючого параметра α

Для інформації одержуємо

$$I_{>} = -\frac{1}{2} \ln 2\alpha + \frac{1}{2} \ln \pi + \ln 2 + \frac{1}{2} - \ln \varepsilon. \quad (5.59)$$

Як і в попередньому випадку, стала ε визначає похибку обчислень. Ця похибка задається параметром α , який визначає швидкість спадання гаусівської функції. Для системи нижче порога швидкість спадання задавалася α , а для системи вище порога — 2α . Будемо вимагати виконання умови $-\frac{1}{2} \ln 2\alpha = \ln \varepsilon$. Порівняння виразів для $I_{<}$ та $I_{>}$ приводить до різниці

$$\Delta I = I_{>} - I_{<} = \ln 2. \quad (5.60)$$

Таким чином, система підвищила інформацію (знизила ентропію) при переході до упорядкованого стану. Тепер вона зберігає 1 біт інформації. Точний розрахунок інформації наведено на рис.5.11.

5.3 Спряжені змінні [1, 7, 10]

Стан термодинамічної рівноваги визначається значеннями відповідних термодинамічних змінних. Такі змінні можна розділити на *екстенсивні*, або пропорційні повній масі системи, та *інтенсивні*, ті, що не залежать від повної маси системи. Інтенсивні та екстенсивні змінні є парами спряжених змінних (табл.5.2).

Таблиця 5.2 — Пари спряжених змінних

Екстенсивні		Інтенсивні	
Ентропія	S	T	Температура
Об'єм	V	P	Тиск
Число молів	N	μ	Хімічний потенціал
Деформація	ϵ_{ij}	σ_{ij}	Напруга
Поляризація	\mathbf{P}	\mathbf{E}	Напруженість електричного поля
Намагніченість	\mathbf{M}	\mathbf{H}	Напруженість магнітного поля
Кутовий момент	\mathbf{J}	$\mathbf{\Omega}$	Кутова швидкість
Поверхня подій чорної дірки	A	k	Поверхнева гравітація чорної дірки



Приклад. Еволюція деформованого тіла

Для опису еволюції однорідної системи типу деформованого тіла використовують деформацію (пластичну деформацію) ϵ та напругу σ як спряжені змінні, для яких у найпростішому вигляді маємо рівняння

$$\dot{\epsilon} = -\frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\sigma}{\eta},$$

$$\dot{\sigma} = \frac{\sigma_e - \sigma}{\tau_\sigma} - g\sigma\epsilon.$$

Перше рівняння є рівнянням Максвелла для в'язкопружного середовища з часом релаксації $\tau = \eta/\mu$ (η — в'язкість зсуву, μ — модуль зсуву). Друге рівняння описує релаксацію напруги до значення, що визначається зовнішньою напругою σ_e із часом релаксації τ_σ , другий член визначає нелінійні ефекти негативного зворотного зв'язку, що пов'язаний зі зменшенням напруги за рахунок концентрації енергії пластичної деформації $\sigma\epsilon$.

Не всі з n екстенсивних E^α та n інтенсивних i_α спряжених змінних, що описують систему в стані рівноваги, є незалежними. Лише n із набору $2n$ змінних набувають незалежних значень. Останні змінні однозначно визначаються через незалежні:

$$i_\alpha = i_\alpha(E^\beta). \quad (5.61)$$

Співвідношення такого типу є *рівняннями станів*.

5.3.1 Узагальнюючі положення

Загалом інтенсивні змінні розглядаються як змінні станів, а екстенсивні — керуючі параметри. Тоді для опису системи доцільно ввести узагальнений термодинамічний потенціал $\mathcal{U}(i_\alpha; E^\beta)$, який визначає критичне багатотворення системи $\nabla\mathcal{U}(i_\alpha; E^\beta)$.

Критичні точки потенціалу $\mathcal{U}(i_\alpha; E^\alpha)$ визначаються за рівнянням

$$\nabla_i\mathcal{U}(i_\alpha; E^\beta) = 0, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq n. \quad (5.62)$$

Розв'язуючи це рівняння для кожного локального мінімуму, знаходимо інтенсивні змінні

$$i_\alpha = i_\alpha^{(r)}(E^\beta), \quad r = 1, 2, \dots \quad (5.63)$$

У кожному мінімумі значення потенціалу \mathcal{U} є функцією керуючих параметрів

$$U^{(r)}(E^\beta) = \mathcal{U}(i_\alpha^{(r)}(E^\beta); E^\beta). \quad (5.64)$$

Стан системи визначається глобальним мінімумом

$$U(E^\beta) = \min_{r=1,2,\dots} U^{(r)}(E^\beta). \quad (5.65)$$

Інтенсивні змінні задаються градієнтами потенціалу \mathcal{U} , визначеними на критичному багатотворенні

$$i_\alpha = \left. \frac{\partial\mathcal{U}(i, E)}{\partial E^\alpha} \right|_{\text{крит. багатотв.}} \quad (5.66)$$

При зміні керуючих параметрів ($E^\beta \rightarrow E^\beta + \delta E^\beta$) та змінних станів ($i_\alpha \rightarrow i_\alpha + \delta i_\alpha$) маємо таку зміну потенціалу:

$$\mathcal{U}(i_\alpha + \delta i_\alpha; E^\beta + \delta E^\beta) = \mathcal{U}^{(0)} + \delta^{(1)}\mathcal{U} + \delta^{(2)}\mathcal{U} + \dots, \quad (5.67)$$

де

$$\begin{aligned} \delta^{(1)}\mathcal{U} &= \frac{\partial\mathcal{U}}{\partial i_r} \delta i_r + \frac{\partial\mathcal{U}}{\partial E^\alpha} \delta E^\alpha, \\ \delta^{(2)}\mathcal{U} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2\mathcal{U}}{\partial i_r \partial i_s} \delta i_r \delta i_s + \frac{\partial^2\mathcal{U}}{\partial i_r \partial E^\beta} \delta i_r \delta E^\beta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\mathcal{U}}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} \delta E^\alpha \delta E^\beta. \end{aligned} \quad (5.68)$$

На критичному багатотворенні ці рівняння перетворюються у рівняння

$$\begin{aligned} \delta^{(1)}U &= \frac{\partial U}{\partial E^\alpha} \delta E^\alpha, \\ \delta^{(2)}U &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} \delta E^\alpha \delta E^\beta. \end{aligned} \quad (5.69)$$

Перше рівняння є *першим початком термодинаміки*

$$\delta^{(1)}U = TdS - PdV + \mu_j dN_j. \quad (5.70)$$

Другий початок термодинаміки є умовою стійкості

$$\frac{\partial^2 U}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} \delta E^\alpha \delta E^\beta = U_{\alpha, \beta} \delta E^\alpha \delta E^\beta \geq 0, \quad (5.71)$$

де рівняння виконується лише, коли варіації керуючих параметрів є тривіальними.

5.3.2 Принцип Ле–Шательє

Принцип Ле–Шательє пов’язується із другим початком термодинаміки. Його формулювання є таким: *зовнішня сила, що збурює рівноважний стан, викликає в системі процеси, що намагаються послабити дію цієї сили*. Математично він означає позитивність тензора $U_{\alpha, \beta}$. Цей принцип розглядається як постулат термодинаміки нерівноважних систем, який належить до процесу переходу зі збуреного стану до рівноваги.

Якщо на систему, що перебуває у стані рівноваги діє адіабатичне збурення, то сприйнятливність визначається як $U_{\alpha, \beta}$. Якщо час дії збурень менше за час відгуку, то система реагує «енергичніше» — нерівноважний відгук $U_{\alpha, \beta}$ більший за рівноважний $U_{\alpha, \beta}$. Це і є проявом принципу Ле–Шательє.

Розглянемо випадок збурення системи виведенням її зі стану рівноваги. Нехай інтенсивні змінні є фіксованими, а екстенсивні збуреними. Тоді відповідна градієнтна система має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^\alpha}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial E^\alpha} (\mathcal{U} - i_\beta E^\beta) = \\ &= -\frac{\partial}{\partial E^\alpha} \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial E^\alpha} E^\alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{U}}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} \delta E^\alpha \delta E^\beta + \dots - i_\beta E^\beta \right) = \\ &= -\frac{\partial^2 \mathcal{U}}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} \delta E^\alpha + O(2). \end{aligned} \quad (5.72)$$

Систему можна перевести у нерівноважний стан, підтримуючи в ній потоки (тепла, зарядів). Тоді в системі можливими стають перехресні ефекти. Коли в системі існує декілька градієнтів, то потоки стають залежними від їх сукупності, тобто поблизу критичного багатотворення узагальнені токи j^α пов’язані з узагальненими силами F_β через тензор сприйнятливості $L^{\alpha\beta}$ співвідношенням

$$j^\alpha = L^{\alpha\beta} F_\beta, \quad (5.73)$$

де

$$j^\alpha \simeq \frac{dE_\alpha}{dt}, \quad F_\beta \simeq \nabla i_\beta. \quad (5.74)$$

За умови відсутності магнітного поля тензор L є симетричним:

$$L^{\alpha\beta} = L^{\beta\alpha}. \quad (5.75)$$

Формула (5.75) відома як співвідношення Онзагера і виражає симетрію кінетичних коефіцієнтів системи.

Розділ 6

Синергетичні переходи

У синергетиці вивчають загальні властивості складних систем. При цьому увага зосереджується на розгляданні різких макроскопічних змін у системі. Інтерес являють структурні зміни, які відмічаються на траєкторіях. Під структурними змінами розуміють ситуації, в яких взаємно однозначна відповідність стає неможливою. При таких змінах система стає нестійкою у лінійному наближенні. У точці, де відбувається втрата стійкості, можливим стає вилучення багатьох степенів вільності, тому макроскопічна поведінка системи залежить лише від невеликої кількості ступенів вільності.

6.1 Параметр порядку та принцип підпорядкування [2, 3]

Розглянемо систему еволюційних рівнянь

$$\dot{x} = \alpha x - xy, \quad (6.1)$$

$$\dot{y} = -\beta y + x^2, \quad (6.2)$$

яка застосовується у широкій області наук. Змінні x та y є нестійкою та стійкою модами. Перше рівняння описує автокаталітичне виробництво речовини x (член αx) і витрати цієї речовини при взаємодії з речовиною y (член $-xy$). Друге рівняння описує спонтанний розпад молекул речовини y (член $-\beta y$) та виробництво речовини y із молекул речовини x завдяки бімолекулярній реакції (член x^2). Зробимо такі припущення:

$$\alpha \geq 0, \quad \beta > 0. \quad (6.3)$$

Рівняння (6.2) легко інтегрується у квадратах

$$y(t) = \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-\tau)} x^2(\tau) d\tau, \quad (6.4)$$

початкову умову вибрано $y = 0$, що відображається нижньою границею $\text{linebreak } t = -\infty$. Такий інтеграл існує за умови обмеженості $|x^2(\tau)|$ при всіх τ або $|x^2(\tau)|$ розбігається повільніше за $\exp(|\beta\tau|)$ при $\tau \rightarrow -\infty$. Така умова має назву *умови самоузгодженості*.

Інтеграл у (6.4) обчислюється за правилом

$$\int v w dt = v w - \int v \dot{w} dt.$$

Ототожнюючи v з $\exp(-\beta(t - \tau))$, а w — з x^2 , надаємо інтегралу вигляду

$$y(t) = \frac{1}{\beta} x^2(t) - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-\tau)} 2(x\dot{x})_{\tau} d\tau. \quad (6.5)$$

Розглянемо випадок, коли x змінюється настільки уповільнено, що \dot{x} можна вважати малою величиною. Це припущення є *адіабатичним наближенням*, згідно з яким

$$y(t) \approx \frac{1}{\beta} x^2(t). \quad (6.6)$$

Такий розв'язок можна отримати, припустивши $\dot{y} = 0$.

З'ясуємо, за яких умов можна знехтувати величиною $(x\dot{x})_{\tau}$. Замінімо величину $(x\dot{x})_{\tau}$ на $(|x||\dot{x}|)_{max}$ і винесемо максимальне значення з-під знака інтеграла. Експонента, що залишилася, легко інтегрується, і ми одержуємо умову

$$\frac{(|x||\dot{x}|)_{max}}{\beta^2} \ll \frac{|x|^2}{\beta}. \quad (6.7)$$

Вона виконується, якщо

$$|\dot{x}|_{max} \ll \beta|x|. \quad (6.8)$$

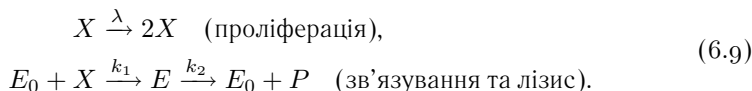
Вираз (6.8) задає адіабатичне наближення: ми потребуємо, щоб величина x змінювалась достатньо повільно у порівнянні зі змінною, що приписується сталій β .

У рамках наведеного формалізму можна сказати, що *у підпорядковується* змінній x . У загальному випадку ми можемо виразити декілька змінних через одну, завдяки *принципу підпорядкування*, що приводить до одного рівняння для змінної, наприклад, x . У таких випадках змінна x є *параметром порядку*. Між параметром порядку, принципом підпорядкування та втратою стійкості існує принциповий зв'язок. При зміні керуючих параметрів система може втратити стійкість у лінійному наближенні. У таких випадках α змінює свій знак, тобто стає малою величиною. У такому разі застосовується принцип підпорядкування. Таким чином, у точках, де відбувається структурна зміна, поведінка системи визначається параметром порядку.

6.2 Порогові явища в клітинній динаміці [5]

Як приклад застосування принципу адиабатичного наближення розглянемо клітинну систему, в якій деякі клітини втратили свої біологічні функції і перетворили тканину у злоякісну. Вона прагне захопити всю область організму за рахунок проліферації, яка протидіє їй дії. Подальша доля організму визначається конкурентною боротьбою клітин, яка подається пороговим явищем.

Нехай X — густина популяції проліферуючих клітин—мішенів (злоякісної пухлини), E_0 — густина вільних цитотоксичних клітин. Згідно з експериментом клітини E_0 розпізнають клітини X , фіксують їх у вигляді комплексу $E = E_0X$, а далі здійснюють їх лізис при дисоціації комплексу E . Цю послідовність реакцій записують у вигляді



Припустимо, що в процесі конкуренції клітин X та E_0 стан імунної системи можна вважати стаціонарним. Це означає, що повна густина популяції вільних та зв'язаних імунних клітин ($E_t = E + E_0$) є сталою величиною. Припустимо, що оборотних зв'язків у другому рівнянні не існує.

За даних умов еволюційні рівняння набувають вигляду

$$\begin{aligned} \dot{X} &= \lambda X(1 - X/N) - k_1 E_0 X, \\ \dot{E}_0 &= -k_1 E_0 X + k_2 E. \end{aligned} \quad (6.10)$$

У першому рівнянні множник $(1 - X/N)$ відображає існування верхньої границі N для X всередині елемента об'єму, в якому відбувається конкурентна боротьба. Оскільки лізис проходить набагато швидше за інші стадії, то можна вважати справедливим адиабатичне наближення $\dot{E}_0 \simeq 0$. Враховуючи зв'язок $E_t = E + E_0$ виражаємо з другого рівняння E_0 через X та E_t , що дає

$$\dot{X} = \left(1 - \frac{X}{N}\right) \lambda X - \frac{k_1 E_t X}{1 + \frac{k_1}{k_2} X}. \quad (6.11)$$

Вимірюючи час t в одиницях λt , густину x — в $k_1 X/k_2$ та вводячи знерозмірені параметри $\beta = k_1 E_t/\lambda$, $\theta = k_2/k_1 N$, еволюційне рівняння можна записати у вигляді

$$\dot{x} = (1 - \theta x)x - \frac{\beta x}{1 + x} \equiv f(x), \quad f(x) = -\frac{dV(x)}{dx}, \quad (6.12)$$

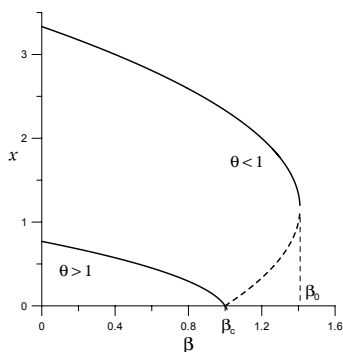


Рисунок 6.1 — Стаціонарна концентрація пухлинних клітин залежно від параметра β , що характеризує активність імунної системи. Нормальний стан визначається $x = 0$, пухлинний — $x > 0$

де введено синергетичний потенціал

$$V(x) = \frac{\theta}{3}x^3 - \frac{1}{2}x^2 + \beta[x - \ln(1+x)]. \quad (6.13)$$

Одержане еволюційне рівняння завжди має стаціонарний розв'язок $x = 0$. Він є нестійким за умови $\beta < 1$ та стійким при $\beta > 1$. Ненульовий розв'язок

$$x_s = \frac{1 - \theta \pm \sqrt{(1 + \theta)^2 - 4\theta\beta}}{2\theta} \quad (6.14)$$

означає пухлинний стан тканини. Залежно від θ можуть виникати різні типи поведінки (рис.6.1). Так при $\theta > 1$ пухлина існує при слабкій імунній реакції $\beta < 1$, а пригнічується при переході величиною β значення $\beta_c = 1$. У випадку $\theta < 1$ в області значень $1 < \beta < \beta_0 = (1 + \theta)^2/4\theta$ нормальний та пухлинний стан стійкі одночасно. Пригнічення пухлини можливе при перевищенні порога β_0 .

6.3 Синергетична концепція фазового переходу [12]

Універсальність картини фазових переходів, що пов'язана з виконанням гіпотези масштабної інваріантності, властива не лише термодинамічній поведінці, але також кінетичній (динамічній). Якщо припустити, що параметр порядку $x(t)$ може змінюватися неавтономним чином, то за наявності стрикційних

ефектів упорядкування середовища супроводжується появою поля деформації (другорядний ефект), пов'язаного з появою самоузгодженого поля, спряженого параметра порядку. Загалом вважається, що ці два поля слідують за змінною $x(t)$. Виконання цієї умови приводить до ієрархії часів релаксації: τ_h — час релаксації величини спряженого поля $h(t)$ стає набагато меншим за τ_x — час релаксації параметра порядку $x(t)$. Стрикційний ефект приводить до далекодійного поля, що перенормує термодинамічний потенціал так, що відбувається уповільнення фазового переходу. Цю обставину можна трактувати як прояв принципу Ле—Шательє. Цей принцип відображає негативний зворотний зв'язок між величинами $x(t)$ та $h(t)$. Універсальність кінетичної картини проявляється у припущенні, що поведінка системи визначається додатковою ступінню вільності ε , час релаксації якої τ_ε є сумірним із часом релаксації параметра порядку. Тоді стає можливим виділення характерної поведінки системи, коли мікроскопічні деталі стають несуттєвими.

6.3.1 Система Лоренца [2]

Синергетичний підхід до опису фазових переходів полягає у взаємоузгодженому врахуванні трьох степенів вільності, що становлять вектор стану $\mathbf{x} = (x, h, \varepsilon)$. У загальному вигляді еволюційне рівняння цього вектора є таким:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\alpha}), \quad (6.15)$$

де $\mathbf{f}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\alpha})$ задає зв'язки між змінними системи через параметри $\boldsymbol{\alpha}$. Пара змінних x та h пов'язана негативним зворотним зв'язком. Основою синергетичного підходу є та обставина, що позитивний зворотний зв'язок між другою парою x та ε може привести до самоорганізації, яка є причиною фазового переходу.

З математичної точки зору найпростішою системою, що враховує зазначені обставини, є система Лоренца, одержана при описі руху атмосферних потоків [9] і вперше запропонована Хакеном для опису самоорганізації у лазерах [2]. Модель Лоренца має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\frac{x}{\tau_x} + g_x h, \\ \dot{h} &= -\frac{h}{\tau_h} + g_h x \varepsilon, \\ \dot{\varepsilon} &= \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon}{\tau_\varepsilon} - g_\varepsilon x h. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Тут перші доданки враховують ефект дисипації, властивий синергетичним системам, негативний зворотний зв'язок між x та h приводить до зменшення ке-

руючого параметра ε , який при взаємодії з параметром порядку збільшує спряжене поле h ; g_x, g_h, g_ε — позитивні константи зв'язку. За відсутності нелінійних складових параметр порядку та спряжене поле релаксують до стаціонарних значень $x = 0, h = 0$, а керуючий параметр до значення $\varepsilon = \varepsilon_0$, яке визначає інтенсивність впливу середовища.

6.3.2 Переходи другого роду

Загалом при дослідженні термодинаміки фазового переходу вважається така ієрархія часів релаксації: $\tau_x \gg \tau_h, \tau_\varepsilon$. Це означає, що в ході своєї еволюції спряжене поле та керуючий параметр змінюються настільки швидко, що фактично всі їхні збурення затухають у порівнянні з часом зміни параметра порядку. Тому h та ε йдуть за змінами найповільнішої моди — параметра порядку. Як було з'ясовано вище, виділяючи малі параметри τ_h, τ_ε , можна перейти до однопараметричної системи. Дійсно, за умови $\tau_h \dot{h} \simeq 0, \tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} \simeq 0$ маємо:

$$h = a_h \varepsilon_0 x (1 + x^2/x_m^2)^{-1}, \quad (6.17)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 (1 + x^2/x_m^2)^{-1}, \quad (6.18)$$

$$x_m^{-2} = a_\varepsilon a_h, \quad a_{h,\varepsilon} = \tau_{h,\varepsilon} g_{h,\varepsilon}. \quad (6.19)$$

Підставляючи одержані вирази для керуючого параметра та спряженого поля через параметр порядку в перше рівняння системи Лоренца, одержуємо рівняння Ландау—Халатнікова

$$\tau_x \dot{x} = -dV/dx, \quad (6.20)$$

де синергетичний потенціал має вигляд

$$V = \frac{x^2}{2} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_c} \left(\frac{x}{x_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{x}{x_m} \right)^2 \right] \right\}, \quad \varepsilon_c = (a_h a_\varepsilon)^{-1}. \quad (6.21)$$

Якщо величина ε_0 не перевищує критичне значення ε_c , то потенціал має монотонно зростаючий вигляд із єдиним мінімумом у точці $x = 0$, що відповідає неупорядкованій фазі. У закритичній області $\varepsilon_0 > \varepsilon_c$ синергетичний потенціал набуває мінімумів при ненульовому значенні параметра порядку:

$$x_\pm = \pm x_m (\theta - 1)^{1/2}, \quad \theta = \varepsilon_0/\varepsilon_c. \quad (6.22)$$

Це означає, що при різкому переході через критичне значення $\theta = 1$ система за час

$$\tau = \tau_x (\theta - 1)^{-1} \quad (6.23)$$

потрапляє в упорядковану фазу. При цьому часова залежність параметра порядку має звичайний дебаївський вигляд

$$x(t) = x_0(1 - e^{-t/\tau}). \quad (6.24)$$

Зауважимо, що фазовий перехід відповідає катастрофі зборки A_3 . Дійсно, припустивши, що $x^2 \leq 1$, можна розкласти потенціал за степенями x^2 . У результаті одержуємо x^4 -модель.

Двопараметричні моделі. Особливий інтерес являють двопараметричні системи, які можна одержати із системи Лоренца при врахуванні таких випадків: $\tau_h \ll \tau_x, \tau_\varepsilon$; $\tau_x \ll \tau_h, \tau_\varepsilon$; $\tau_\varepsilon \ll \tau_x, \tau_h$. Розглянемо їх окремо.

Випадок $\tau_h \ll \tau_x, \tau_\varepsilon$. Припустивши $\dot{h} \simeq 0$, маємо

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -x(1 - \theta\varepsilon), \\ \dot{\varepsilon} &= \tau^{-1}(\theta - \varepsilon(1 + x^2)), \end{aligned} \quad (6.25)$$

де $\tau = \tau_\varepsilon/\tau_x$.

На фазовому портреті системи в площині (x, ε) існують дві особливі точки $D(\varepsilon_0, 0)$ та $O(\varepsilon_c, x_0)$, де $x_0 = x_m(\theta - 1)^{1/2}$. При $\theta \leq 1$ точка D є вузлом, а при $\theta > 1$ — сідлом, оскільки показник Ляпунова для неї має вигляд

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [(\theta - 1) - \tau^{-1}] \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} \frac{\theta - 1}{(\theta - 1 - \tau^{-1})^2}} \right). \quad (6.26)$$

Для точки O показник Ляпунова

$$\lambda_O = -\frac{\theta}{2\tau} \left(1 \pm \sqrt{1 - 8\tau(\theta - 1)/\theta^2} \right) \quad (6.27)$$

є дійсним та негативним при $\tau < \tau_c$, де

$$\tau_c = \theta^2/8(\theta - 1). \quad (6.28)$$

При $\tau > \tau_c$ він стає комплексним $\lambda_O = -\alpha + i\omega$. Це означає, що O є фокусом при $1 < \theta \leq 2$, для якого коливання відбуваються з частотою

$$\omega = [8\tau\theta^{-2}(\theta - 1) - 1]^{1/2}\theta/2\tau_\varepsilon, \quad (6.29)$$

а затухання з декрементом

$$\alpha = \theta/2\tau_\varepsilon. \quad (6.30)$$

Зростання параметра збудження θ приводить до затухання коливань.

Випадок $\tau_x \ll \tau_h, \tau_\varepsilon$. Припустивши $\dot{x} \simeq 0$, маємо систему двох рівнянь

$$\begin{aligned} \dot{h} &= -h(1 - \varepsilon), \\ \dot{\varepsilon} &= \tau^{-1}(\theta - (\varepsilon + h^2)), \end{aligned} \quad (6.31)$$

де h, ε, t виміряні в одиницях $h_m = x_m/a_x$, $\varepsilon_c, \tau = \tau_\varepsilon/\tau_h$. На фазовій площині (h, ε) існують дві особливі точки $D(\varepsilon_0, 0)$, $O(\varepsilon_c, h_0)$, де

$$h_0 = h_m(\theta - 1)^{1/2} \quad (6.32)$$

задає стаціонарне значення спряженого поля. Аналіз стійкості в лінійному наближенні дає такі показники Ляпунова:

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [(\theta - 1) - \tau^{-1}] \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} \frac{\theta - 1}{(\theta - 1 - \tau^{-1})^2}} \right), \quad (6.33)$$

$$\lambda_O = -\frac{1}{2\tau} \left(1 \pm \sqrt{1 - 8\tau(\theta - 1)} \right). \quad (6.34)$$

Таким чином, точка D є вузлом при $\theta \leq 1$ та сідлом при $\theta > 1$. Точка O реалізується лише при $\theta > 1$, де вона є притягуючим вузлом при малих τ та фокусом, якщо $\tau > \tau_c$, де

$$\tau_c^{-1} = 8(\theta - 1). \quad (6.35)$$

Відповідна частота та декремент затухання є такими:

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{2} [8\tau(\theta - 1) - 1]^{1/2} \tau_\varepsilon^{-1}, \\ \alpha &= (2\tau_\varepsilon)^{-1}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Таким чином, із підвищенням температури θ величина τ_c зменшується, частота коливань зростає, а затухання відбуваються з тим самим декрементом.

Випадок $\tau_\varepsilon \ll \tau_x, \tau_h$. Припустивши, що $\dot{\varepsilon} \simeq 0$, маємо систему рівнянь

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -x + h, \\ \dot{h} &= \tau^{-1}(\theta x - h(1 + x^2)), \end{aligned} \quad (6.37)$$

де x, h, t виміряні в одиницях x_m, h_m, τ_x , та введено $\tau = \tau_h/\tau_x$.

Фазовий портрет системи має особливі точки D та O із координатами відповідно $(0, 0)$ і $(h_m \sqrt{\theta - 1}, x_m \sqrt{\theta - 1})$. Як і раніше, точка O реалізується за умови $\theta > 1$. Показники Ляпунова є такими:

$$\lambda_D = -\frac{1}{2} [1 + \tau^{-1}] \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} \frac{\theta - 1}{(1 + \tau^{-1})^2}} \right), \quad (6.38)$$

$$\lambda_O = -\frac{1 + \tau^{-1}\theta}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \frac{\theta - 1}{(\theta + \tau)^2}} \right). \quad (6.39)$$

При $\theta \leq 1$ точка D є вузлом, а при $\theta > 1$ стає сідлом. Точка O характеризує упорядковану фазу (фокус) при $\tau \in [\tau_-, \tau_+]$, де

$$\tau_{\pm} = (3\theta - 4) \pm \sqrt{8(\theta - 1)(\theta - 2)}. \quad (6.40)$$

Для частоти та коефіцієнту затухання маємо

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{2} [8\tau(\theta - 1) - (\tau + \theta)^2]^{1/2} \tau_h - 1, \\ \alpha &= (\tau + \theta)/2\tau_h. \end{aligned} \quad (6.41)$$

6.3.3 Переходи першого роду

У рамках синергетичної системи Лоренца вдається перейти до опису переходів першого роду, якщо припустити, що час релаксації параметра порядку τ_x стає залежним від самого параметра порядку, тобто

$$\tau_x^{-1} \rightarrow \tau_x^{-1}(x) = \tau_0^{-1} \left(1 + \frac{\kappa}{1 + (x/x_\tau)^2} \right), \quad (6.42)$$

де τ_0 , κ , x_τ . У рамках адіабатичного наближення $\tau_0 \gg \tau_h, \tau_\varepsilon$ приходимо до рівняння Ландау—Халатнікова з потенціалом

$$V = \frac{x^2}{2} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{c0}} \left(\frac{x}{x_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{x}{x_m} \right)^2 \right] \right\} + \frac{\kappa x_\tau}{2} \ln \left[1 + \left(\frac{x}{x_\tau} \right)^2 \right], \quad (6.43)$$

де $\varepsilon_{c0} = (\tau_0 \tau_h g_x g_h)^{-1}$ — позитивна стала. При $\varepsilon_0 \ll 1$ на залежності $V(x)$ спочатку реалізується точка перегину, мінімум потенціалу лежить у точці $x = 0$. При значенні

$$\varepsilon_c^0 = \varepsilon_{c0} \left(1 + \frac{x_\tau^2}{x_m^2} (\kappa - 1) + 2 \frac{x_\tau}{x_m} \sqrt{\kappa \left[1 - \frac{x_\tau^2}{x_m^2} \right]} \right) \quad (6.44)$$

з'являється плато, яке при $\varepsilon_0 > \varepsilon_c^0$ трансформується у мінімум, для якого $x_0 \neq 0$, та максимум, що розділяє неупорядковану ($x = 0$) та упорядковану ($x \neq 0$) фази. З подальшим зростанням ε_0 мінімум упорядкованої фази поглиблюється, а висота бар'єра спадає й набуває нульового значення при

$$\varepsilon_c = \varepsilon_{c0}(1 + \kappa). \quad (6.45)$$

Стационарне значення параметра порядку є таким:

$$x_0 = x_{00} \left(1 + \left[1 + \left(\frac{x_m x_\tau}{x_{00}^2} \right)^2 \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_c}{\varepsilon_{c0}} \right]^{1/2} \right)^{1/2}, \quad (6.46)$$

де

$$x_{00} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{c0}} - 1 \right) x_m^2 - (1 + \kappa) x_\tau^2 \right]. \quad (6.47)$$

Енергетичний бар'єр, властивий фазовим переходам першого роду, проявляється при величинах $x_\tau/x_m < 1$.

У цій системі також можливим стає комбінація співвідношень часів релаксації мод для проведення дослідження кінетичних особливостей системи.

Розділ 7

Теорія зародкоутворення

Якщо речовина перебуває у метастабільному стані, то вона перейде в інший — стійкий стан (переохолоджена пара конденсується у рідину, перегріта рідина перетворюється у пару). Цей перехід відбувається так: в однорідній фазі утворюються невеликі скупчення іншої фази завдяки флуктуаціям. Якщо, наприклад, пара є стійкою фазою, то виділення нової фази є нестійкими і зникають із часом. Якщо пара є переохолодженою, то при великих розмірах виділень нової фази вона починає зростати; ці виділення стають центрами конденсації пари. Великі розміри є необхідними для компенсації енергетично не вигідного ефекту появи поверхні розділення між фазами. Таким чином, існує мінімальний крити-

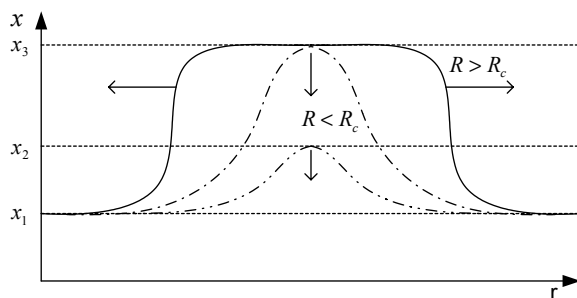


Рисунок 7.1 — Типова картина еволюції локального збурення.

чний розмір, який повинен мати зародок нової фази у метастабільній фазі, для того, щоб він став центром утворення цієї фази. Оскільки для розмірів, більших або менших за критичний, існує лише одна фаза, то критичний зародок перебуває у нестійкій рівновазі з метастабільною фазою.

7.1 Умови утворення зародків [7]

Розглянемо утворення зародків у ізотропних середовищах — краплинок рідини у переохолодженій парі або бульбашок пари у перегрітій рідині. Зародок можна вважати кулькоподібним, а тому за умови малості його розмірів знехтувати впливом сили тяжіння на його форму. Якщо виник зародок нової фази, то існує поверхня розділення між фазами. Тоді термодинамічний потенціал си-

стеми з двох фаз визначається *поверхневим натягом та поверхневим тиском*.

Поверхневий натяг. Термодинамічні властивості поверхні розділення визначаються однією функцією (функцією стану). Нехай σ — площа поверхні розділення. Робота, що витрачається на процес оберненої зміни цієї площини на безмежно малу величину $d\sigma$, може бути записана у вигляді

$$d\mathcal{R} = \alpha d\sigma, \quad (7.1)$$

де величина α є *коефіцієнтом поверхневого натягу*. При $\alpha < 0$ на контур розділення, що обмежує поверхню, діють сили, що направлені по зовнішній нормалі до нього, які намагаються розтягнути поверхню на безмежність. При $\alpha > 0$ поверхня розділення набула б найменшого можливого значення. Тому якщо одна ізотропна фаза занурена в іншу, то поверхня розділення набуває форми кулі.

При врахуванні поверхневих ефектів до потенціалу внутрішньої енергії додається поверхнева енергія $\alpha d\sigma$. Як основну термодинамічну величину зручно ввести термодинамічний потенціал

$$d\Omega = -SdT - Nd\mu + \alpha d\sigma, \quad (7.2)$$

де $\Omega = \Omega(T, \mu, V, \sigma)$ є функцією температури T , хімічного потенціалу μ , об'єму системи V (вважається сталим) та площини розділення σ . Таким чином, у потенціалі Ω можна виділити об'ємну та поверхневу частини.

Поверхневий тиск. Для фаз, що стикаються, виконується умова тотожності тисків. Якщо поверхня розділення не є плоскою, то змінюються її площа і поверхнева енергія. Тобто викривлення поверхні розділення фаз приводить до появи додаткових сил, і тому тиски обох фаз не будуть однаковими, їх різницю називають *поверхневим тиском*. Тоді умова рівноваги визначається тотожностями температури та хімічних потенціалів.

Якщо існують дві ізотропні фази, ми будемо вважати, що фаза 1 (кулькоподібної форми) занурена у фазу 2. Тоді термодинамічний потенціал задається конструкцією

$$\Omega = -P_1V_1 - P_2V_2 + \alpha\sigma, \quad (7.3)$$

де індекси відповідають фазам, останній доданок визначає поверхневу частину потенціалу. Для хімічних потенціалів маємо умову $\mu_1(P_1, T) = \mu_2(P_2, T) = \mu$,

що означає сталість тисків та температури; сталим вважається і α . За умови $V_1 + V_2 = V = const$ маємо умову мінімальності у вигляді

$$d\Omega = -(P_1 - P_2)dV_1 + \alpha d\sigma = 0. \quad (7.4)$$

У разі $V_1 = 4\pi R^3/3$, $\sigma = 4\pi R^2$, R — радіус кулі, одержуємо формулу

$$P_1 - P_2 = \frac{2\alpha}{R}. \quad (7.5)$$

У границі $R \rightarrow \infty$ приходимо до рівняння $P_1 = P_2$. Для критичного радіуса впливає вираз

$$R_c = \frac{2\alpha}{P_N - P_M}, \quad (7.6)$$

де індекси M , N відповідають новій (зародок) та матричній (основну) фазам.

7.2 Флуктуаційне виникнення зародків [7, 13]

Імовірність флуктуаційного виникнення зародка задається гібсівським розподілом $p \propto \exp(-\mathcal{R}_{min}/T)$, де \mathcal{R}_{min} — мінімальна робота, необхідна для його створення. Робота визначається зміною термодинамічного потенціалу за умови сталості певних змінних. Так, якщо μ і T не змінюються в процесі створення зародка, то

$$\mathcal{R}_{min} = \Delta\Omega = \Omega_N - \Omega_M, \quad \mu, T = const. \quad (7.7)$$

До створення зародка об'єм метастабільної фази $V_M + V_N$, а її потенціал $\Omega_M = -P_M(V_M + V_N)$. Після створення зародка об'ємом V_N потенціал усієї системи є таким: $\Omega = -P_M V_M - P_N V_N + \alpha\sigma$. Тому

$$\mathcal{R}_{min} = -(P_N - P_M)V_N + \alpha\sigma. \quad (7.8)$$

Для кулькоподібного зародка $V_N = 3\pi R^3/3$, $\sigma = 4\pi R^2$, замінюючи R виразом (7.6), знаходимо

$$\mathcal{R}_{min} = \frac{16\pi\alpha^2}{3(P_N - P_M)^2}. \quad (7.9)$$

Позначимо за допомогою P_0 тиск обох фаз при температурі T при плоскій поверхні розділення. Тоді при $P = P_0$ величина T є точкою фазового переходу, що визначає перегрів або переохолодження. У разі коли метастабільна фаза слабоперегріта або переохолоджена, то в тотожності хімічних потенціалів

$$\begin{aligned} \mu_N(P_N, T) &= \mu_M(P_M, T), \\ \mu_N(P_0, T) &= \mu_M(P_0, T) \end{aligned} \quad (7.10)$$

або

$$\mu_N(P_N, T) - \mu_N(P_0, T) = \mu_M(P_M, T) - \mu_M(P_0, T) \quad (7.11)$$

можна провести розкладання в ряд за степенями $\delta P_M = P_M - P_0$ і $\delta P_N = P_N - P_0$. За умови визначення $d\mu = -sdT + vdP$, де s, v — ентропія та об'єм однієї молекули, маємо співвідношення

$$v_N \delta P_N = v_M \delta P_M. \quad (7.12)$$

Замінюючи P_N та P_M на δP_N і δP_M у (7.6), знаходимо

$$\delta P_N = \frac{2\alpha}{R} \frac{v_M}{v_M - v_N}, \quad \delta P_M = \frac{2\alpha}{R} \frac{v_N}{v_M - v_N}. \quad (7.13)$$

Приклад. Імовірності утворення нової фази у системі рідина-пара

Для краплини рідини у парі маємо $v_N \ll v_M$; розглядаючи пару як ідеальний газ, одержуємо $v_M = T/P_M \simeq T/P_0$. Отже,

$$\delta P_{\text{рідина}} = \frac{2\alpha}{R}, \quad \delta P_{\text{пара}} = \frac{2\alpha v_{\text{рідина}}}{RT} P_0. \quad (7.14)$$

Використовуючи зв'язок (7.12), одержуємо ймовірність утворення зародка у перегрітій або переохолодженій фазі:

$$p \propto \exp\left(-\frac{16\alpha^3 v_N^2}{3T(v_M - v_N)^2 (\delta P_M)^2}\right). \quad (7.15)$$

Якщо розглядати виникнення бульбашок пари у перегрітій рідині, то $v_N \ll v_M$, а тому

$$p_{\text{пара}} \propto \exp\left(-\frac{16\alpha^3}{3T(\delta P_{\text{рідина}})^2}\right); \quad (7.16)$$

імовірність утворення краплинок рідини у переохолодженій парі ($v_M = T/P_M \simeq T/P_0$) буде такою:

$$p_{\text{рідина}} \propto \exp\left(-\frac{16\alpha^3 v_{\text{пара}}^2 P_0^2}{3T^3 (\delta P_{\text{рідина}})^2}\right). \quad (7.17)$$

Враховуючи формулу Клапейрона–Клаузіуса

$$\delta P = \frac{q}{T_0(v_M - v_N)} \delta T,$$

де q — молекулярна теплота переходу з метастабільної фази у фазу зародка, можна одержати вираз імовірності через температуру, враховуючи визначення (7.15):

$$p \propto \exp\left(-\frac{16\alpha^3 v_N^2 T_0}{3q^2 (\delta T_M)^2}\right). \quad (7.18)$$

Імовірність виникнення зародка довільного розміру. Метастабільну фазу можна розглядати як середовище, в якому міститься зародок. Робота на його утворення є такою: $\mathcal{R}_{min} = \Delta(U - T_0 S + P_0 V)$. Якщо процес відбувається при сталій температурі (температурі середовища), то $\mathcal{R}_{min} = \Delta(F + P_0 V)$. Далі достатньо розглянути кількість речовини, що переходить у нову фазу. Тоді

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{min} &= (F_N(P_N) + P_M V_N + \alpha\sigma) - (F_M(P_M) + P_M V_M) = \\ &= \Phi_N(P_N) - \Phi_M(P_M) - (P_N - P_M)V_N + \alpha\sigma, \quad \Phi = n\mu, \quad n = V/v. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Вважаючи степінь метастабільності малою, можна припустити, що

$$\Phi_N(P_N) \simeq \Phi_N(P_M) + (P_N - P_M)V_N,$$

в результаті маємо

$$\mathcal{R}_{min} = n(\mu_N(P_M) - \mu_M(P_M)) + \alpha\sigma. \quad (7.20)$$

Для кулькоподібного зародка

$$\mathcal{R}_{min} = -\frac{4\pi R^3}{3v_N}(\mu_N(P_M) - \mu_M(P_M)) + 4\pi R^2 \alpha. \quad (7.21)$$

Залежність $\mathcal{R}_{min}(R)$ описує потенціальний бар'єр, який необхідно подолати при створенні стійкого зародка, і вона має максимум за умови

$$R = R_c = \frac{2\alpha v_N}{\mu_M(P_M) - \mu_N(P_M)}, \quad (7.22)$$

що відповідає критичному розміру зародка.

Оскільки стан метастабільної фази не відповідає повній статистичній рівновазі, то наведений розподіл відповідає часу, меншому за час створення зародків, за яким йде перехід у нову фазу. Тому термодинамічне обчислення ймовірності стає можливим лише при $R < R_c$; великі зародки розвиваються у нову

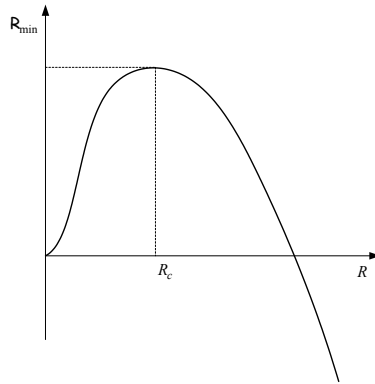


Рисунок 7.2 — Залежність мінімальної роботи з утворення зародка нової фази від розміру зародка. Максимуму залежності відповідає критичний розмір зародка R_c : при $R < R_c$ утворення нової фази стає неможливим (зародок розсмоктується); при $R > R_c$ зародок поглинає всю систему

фазу і не входять у набір мікроскопічних станів, що відповідає макростанові. З одержаного виразу для роботи впливає

$$\mathcal{R}_{min} = -\frac{8\pi\alpha}{3R_c}R^3 + 4\pi R^2\alpha. \quad (7.23)$$

Поблизу максимуму функції $\mathcal{R}_{min}(R)$

$$\mathcal{R}_{min} = \frac{4\pi\alpha}{3}R_c^3 - 4\pi\alpha(R - R_c)^2. \quad (7.24)$$

Максимуму $\mathcal{R}_{min}(R)$ буде відповідати гострий мінімум функції розподілу, для якої можна записати

$$p(R) \propto p_0(R_c) \exp\left(\frac{4\pi\alpha(R - R_c)^2}{T}\right), \quad (7.25)$$

$$p_0(R_c) = \exp\left(-\frac{4\pi\alpha R_c^2}{3T}\right).$$

Фактично за межею $R = R_c$ утворюється масивна кількість нової фази. Точніше, утворення нової фази відбувається в області поблизу цієї точки із шириною $\delta R \sim (T/4\pi\alpha)^{1/2}$. Флуктуаційний розвиток зародків у цій області може з ненульовою ймовірністю перекинути зародки у докритичну область; зародки, що пройшли закритичну область, будуть розвиватися у нову фазу.

7.3 Стадія коалесценції [13]

На початковій стадії фазового переходу відбувається флуктуаційне формування зародків. Загальний об'єм зародків нової фази є настільки малим, що їх утворення й зростання не відбивається на степені метастабільності основної (матричної) фази, а тому критичний розмір зародків вважається сталою величиною. При флуктуаційному утворенні зародків зростання кожного з них не залежить від поведінки інших.

На пізній стадії, коли пересичення розчину стає малим, характер процесу змінюється. Оскільки критичні розміри зародка стають великими, то флуктуаційне утворення є неможливим. Зростання критичних розмірів супроводжується падінням пересичення розчину. Це приводить до того, що менші з утворених зародків стають докритичними і розчиняються. Таким чином, вирішальну роль у такому процесі відіграє стадія «поїдання» малих зародків великими — зростання крупних зародків за рахунок розчинення дрібних (стадія *коалесценції*). Вважається, що утворені зародки знаходяться на великих відстанях, і їхньою взаємодією можна знехтувати. Будемо вважати, що: а) зародки нової фази є нерухомими і зростають за рахунок дифузії з навколишнього розчину; б) зародки є кулькоподібними.

Визначимо рівноважну концентрацію розчину у поверхні зародка з радіусом R . Для цього скористаємось визначенням хімічного потенціалу розчиненої речовини

$$\mu = T \ln c + \psi(P, T), \quad (7.26)$$

де c — концентрація. Нехай $c_{0\infty}$ — концентрація насиченого розчину над площею поверхнею розчиненої речовини (зародка), тоді

$$\mu_0 = T \ln c_{0\infty} + \psi(P, T). \quad (7.27)$$

Різниця потенціалів буде такою:

$$\mu - \mu_0 = T \ln \frac{c}{c_{0\infty}} \simeq \frac{T(c - c_{0\infty})}{c_{0\infty}}. \quad (7.28)$$

Критичний радіус зародка нової фази

$$R_c = \frac{2\alpha v}{\mu - \mu_0} = \frac{2\alpha v c_{0\infty}}{T(c - c_{0\infty})}. \quad (7.29)$$

Концентрація насиченого розчину над сферичною поверхнею радіуса R є такою:

$$c_{0R} = c_{0\infty} \left(1 + \frac{2\alpha v}{TR} \right) = c_{0\infty} + \frac{R_c}{R} (c - c_{0\infty}). \quad (7.30)$$

Підхід речовини до зростаючого докритичного зародка відбувається за рахунок дифузії з навколишнього розчину

$$\frac{\partial c(r)}{\partial t} = D\Delta c(r) = D\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}rc(r) \equiv 0. \quad (7.31)$$

Граничними умовами до дифузійного рівняння є $c(\infty) = c$ (концентрація пересиченого розчину), $c(R) = c_{0R}$. Розв'язок має вигляд

$$c(r) = c - (c - c_{0R})\frac{R}{r}. \quad (7.32)$$

Оскільки концентрація визначена за об'ємною кількістю речовини на 1 см^3 розчину, то дифузійний потік $J = D\partial c/\partial r$ у поверхні зародка збігається зі швидкістю зміни його радіуса:

$$\frac{dR}{dt} = D\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right|_{r=R}. \quad (7.33)$$

Отже, дифузійний потік $J(r) = DR(c - c_{0R})/r^2$, а тому

$$J(R) = \frac{dR}{dt} = \frac{D(c - c_{0R})}{R} = \frac{D}{R}\left(\Delta - \frac{\sigma}{R}\right), \quad (7.34)$$

де $\sigma = 2\alpha v c_{0\infty}/T$, $\Delta = c - c_{0\infty}$ — пересичення розчину. Критичним радіусом буде

$$R_c = \sigma/\Delta(t). \quad (7.35)$$

При $R > R_c$ ($dR/dt > 0$) зародок зростає, при $R < R_c$ ($dR/dt < 0$) — розчинюється. Вимірюючи час в одиницях $R_c(0)/D\sigma$, де $R_c(0)$ — значення критичного радіуса на початку стадії коалесценції, одержуємо рівняння еволюції зародка

$$\frac{dR}{dt} = \frac{R_c^3(0)}{R}\left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R}\right). \quad (7.36)$$

У подальшому доречно ввести величину $x(t) = R_c(t)/R_c(0)$, часовою змінною буде $\tau = 3 \ln x(t)$, невідомою змінною буде $u = R/R_c(t)$. Тоді еволюційне рівняння радіуса зародка набуває вигляду

$$\frac{du^3}{d\tau} = -\frac{dV(u)}{du}, \quad V(u) = \gamma\left(u - \frac{u^2}{2}\right) + \frac{u^4}{4}, \quad (7.37)$$

$$\gamma = \gamma(\tau) = \frac{dt}{x^2 dx} > 0.$$

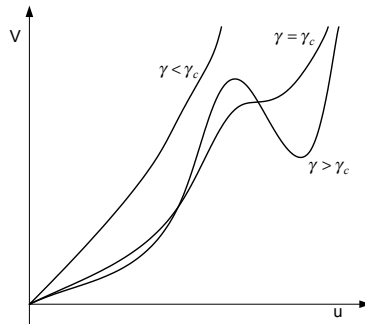


Рисунок 7.3 — Залежність потенціалу виділень при різних значеннях γ

При $\tau \rightarrow \infty$ функція $\gamma(\tau)$ має наближатися до граничного значення. Таким значенням є $\gamma_c = 27/4$, при якому права частина еволюційного рівняння стає нулем у точці $u = u_0 = 3/2$ (на потенціалі з'являється плато). На плато реалізується плавний розподіл зародків за розмірами. При $\gamma > \gamma_c$ швидкість $du^3/d\tau = 0$ у точках $u = u_1$ та $u = u_2$, де $u_1 < u_2$, u_1 — максимум, а u_2 — мінімум потенціалу (рис.7.3). Тому, якщо $u < u_1$, то всі зародки розчиняються, а при $u > u_2$ вони набувають розміру $R = R_c u_2$, який зростає із збільшенням R_c . Це означає, що загальний об'єм зародків нової фази прямував би до безмежності, що неможливо з фізичної точки зору. При $\gamma < \gamma_c$ потенціал перетинає вісь u у точці 0, тобто всі зародки зникають, що теж неможливо. Таким чином, для γ існує одне значення $27/4$.

Граничний закон часової залежності критичного радіуса оцінюється за умови $\gamma = \gamma_c$: $\gamma^{-1} = x^2(dx/dt) = 4/27$. У результаті приходимо до виразу

$$x(t) = \frac{R_c(t)}{R_c(0)} = \left(\frac{4t}{9}\right)^{1/3}. \quad (7.38)$$

7.4 Синергетична картина коалесценції [14]

Картину коалесценції можна розглядати як процес самоорганізації, пов'язаний з дифузійною взаємодією, що приводить до встановлення в системі когерентного стану, який характеризується незалежним від часу максимальним значенням безрозмірного радіуса виділення u . У рамках синергетичного підходу розглядається система, що параметризується величинами радіусом зародка R , дифузійним потоком J та концентрацією лімітуючого компонента c . Само-

узгоджена кінетика часової еволюції цих величин задається системою рівнянь

$$\begin{aligned}\dot{R} &= -R/\tau_R + J, \\ \dot{J} &= -J/\tau_J + v^2 \nabla(c - c_{0R}), \\ \dot{c} &= (c_{0R} - c)/\tau_c + \nabla J,\end{aligned}\quad (7.39)$$

де τ_R , τ_J , τ_c — часи релаксації параметрів R , J та c відповідно; як і раніше, $c_{0R} = c_{0\infty} \left(1 + \frac{R_s}{R}\right)$, де $R_s \equiv 2\alpha v/T$; v — стала швидкості, $\nabla = \partial/\partial r$. Перші складові рівнянь задають дебаївську релаксацію до стаціонарних значень $R = 0$, $J = 0$, $c = c_{0R}$. У стаціонарному випадку дифузійного потоку ($\dot{J} = 0$) маємо стандартний вираз $J(r) = D\nabla(c - c_{0R})$, де коефіцієнт дифузії $D = \tau_J v^2$.

При аналізі синергетичної системи важливим є співвідношення між часами релаксації. Швидкість перескоку на міжатомну відстань $v = a/\tau_J$, де a міжатомна відстань, отже, для найменшого з набору τ_R , τ_J , τ_c одержуємо $\tau_J \simeq a^2/D$. Перерозподіл концентрації c визначається параметром R_s і відбувається з часом $\tau_c \simeq R_s^2/D$. Величина τ_R визначає час, за який усі виділення зіллються у одне. У термодинамічній теорії та в експерименті для виділення фаз у сплавах та пор встановлено таке співвідношення: $\tau_R \gg \tau_c, \tau_J$. Це означає, що за час $\theta = R_s^2/Dc_{0\infty}$ зміни радіуса R потік J та концентрацію c можна вважати сталими, а тому використати адіабатичне наближення. У результаті з другого та третього рівнянь маємо

$$\ell^2 \nabla^2(c - c_{0R}) = c - c_{0R}, \quad \ell^2 = D\tau_c. \quad (7.40)$$

Розв'язок цього рівняння в неекранованій області $r < \ell$ апроксимується гіперболою r^{-1} . Тому похідну у складових другого та третього рівнянь синергетичної системи можна замінити на R^{-1} . Після цього приходимо до рівняння еволюції радіуса виділення у вигляді

$$\dot{R} = -\frac{R}{\tau_R} + \frac{D\Delta}{R} - \frac{c_{0\infty}DR_s}{R^2}, \quad (7.41)$$

де $\Delta = c - c_{0\infty}$ — пересичення. Враховуючи термодинамічний підхід, одержане рівняння містить релаксаційну складову. Очевидно, що релаксація стає суттєвою лише на мезоскопічних об'ємах, коли падає густина виділень (заключна стадія коалесценції): у порах — зародки порядку часток міліметра, у багатофазних системах зерна в декілька мікрометрів.

Одержаному рівнянню еволюції можна надати стандартного вигляду, перейшовши до величини $u = R/R_c$ та логарифмічного часу τ . Вимірюючи час у масштабі $\theta = R_s^2/Dc_{0\infty}$ та вводячи параметр

$$\gamma = 3 \left(\frac{R_c(0)}{R_c} \right)^3 \frac{dt}{d\tau}, \quad R_c^{-3} \frac{dR_c^3}{d\tau} + 3 \frac{\theta}{\tau R} \frac{dt}{d\tau} = 1, \quad (7.42)$$

приходимо до рівняння (7.37).

При $\gamma \geq \gamma_c$ одержуємо

$$R_c = R_s^3(\delta + e^{-\tau})^{-1}; \quad \delta = \gamma\theta/\tau_R; \quad \tau = \ln\left(\gamma^{-1}[e^{\delta t/\gamma} - 1]\right). \quad (7.43)$$

В околі $\delta \rightarrow 0$ приходимо до результатів термодинамічної теорії коалесценції. При остаточнох δ лінійне зростання критичного об'єму $R_c^3(t)$ відбувається за час, обмежений величиною τ_R . За цією межею відбувається стабілізація критичного об'єму при $R_{cm}^3 = \gamma^{-1}c_{0\infty}DR_s/\tau_R$ та перехід від логарифмічного часу τ до фізичного t згідно із співвідношенням $\tau = -\ln \delta + t/\tau_R$.

Розділ 8

Просторово розподілені системи

При розгляді системи, еволюція якої визначається концентрацією, температурою або будь-якою величиною x , що зберігається, до рівняння еволюції додається дифузійна складова, що визначає перемішування. Тоді в загальному вигляді маємо

$$\dot{x} = f(x) + D\Delta x. \quad (8.1)$$

8.1 Загальні властивості структур [8, 15]

Загальне еволюційне рівняння з просторовою неоднорідністю записується як

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{F}(x(\mathbf{r}, t))}{\delta x(\mathbf{r}, t)}, \quad (8.2)$$

де праву частину виражено через варіаційну похідну від функціонала

$$\mathcal{F}(x(\mathbf{r}, t)) = \int d\mathbf{r} \left[V(x) + \frac{D}{2} (\nabla x)^2 \right], \quad (8.3)$$

де D — коефіцієнт, що характеризує інтенсивність неоднорідності (коефіцієнт дифузії). Легко побачити, що підстановка варіаційної похідної від (8.3) у (8.2) приводить до (8.1).

Величина $\mathcal{F}(x(\mathbf{r}, t))$ не збільшується з часом, оскільки

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial x}{\partial t} d\mathbf{r} = - \int \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x(\mathbf{r}, t)} \right)^2 d\mathbf{r}. \quad (8.4)$$

Як і раніше, стійким станам відповідають мінімуми $\mathcal{F}(x(\mathbf{r}, t))$. Під дією збурень система може перейти з локального мінімуму у глобальний.

Однорідні розподіли, що відповідають мінімумам потенціалу \mathcal{F} , називають фазами, причому локальному мінімуму відповідає метастабільна фаза. Метастабільна фаза є нестійкою до збурень. Якщо в ній виник доволі великий зародок стійкої фази, то він починає зростати, даючи початок двом хвилям перемикавання, які розбігаються. Після їх розходження середовище переходить у найбільш стійкий однорідний стан. Критичний розмір зародка визначається конкуренцією двох факторів: 1) створення зародка є енергетично вигідним, якщо x у його середині знаходиться поблизу мінімуму \mathcal{F} ; 2) наявність зародка означає неоднорідність системи, що обумовлює складову $(\nabla x)^2$.

Якщо два мінімуми потенціалу є рівнозначними, то стає можливим стаціонарне існування обох фаз, що розділяються міжфазною межею (тонким перехідним шаром). Коли розмір перехідного шару зіставляється з розміром системи, то область поділу виштовхується на межу й система стає однорідною. В іншому випадку система розбивається на домени, утворюючи структури.

8.2 Аналіз стійкості [1, 4, 5]

У загальному випадку перейдемо до векторів, що дозволяє записати еволюційне рівняння у вигляді

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{D}\Delta\mathbf{x}. \quad (8.5)$$

Для аналізу на стійкість стаціонарного стану \mathbf{x}_0 слід перейти до рівняння для збурень $\varepsilon_{\mathbf{x}}(t, r) = \mathbf{x}(t, r) - \mathbf{x}_0$ та використати лінійний оператор

$$\widehat{\mathcal{L}} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} + \mathbf{D}\Delta, \quad (8.6)$$

який дозволяє записати лінійне рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon_{\mathbf{x}} = \widehat{\mathcal{L}} \varepsilon_{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \cdot \varepsilon_{\mathbf{x}} + \mathbf{D}\Delta \varepsilon_{\mathbf{x}}. \quad (8.7)$$

Для пошуку можливих типів просторової залежності при складній кінетиці, що задається функцією $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, переходимо до знаходження власних значень $-k_m^2$ та власних функцій ϕ_m лапласіана:

$$\Delta \phi_m(\mathbf{r}) = -k_m^2 \phi_m. \quad (8.8)$$

Вони залежать від геометрії простору, вимірності системи та крайових умов. Так, якщо розв'язок шукається на відрізку довжиною L із крайовими умовами

$$\phi_m(r=0) = \phi_m(r=L) = 0, \quad (8.9)$$

то для власних значень та власних функцій маємо

$$k_m = \frac{m\pi}{L}, \quad \phi_m(r) = \sin \frac{m\pi r}{L}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (8.10)$$

Незалежно від вигляду функцій ϕ_m розв'язки лінійного рівняння (8.7) виражаються формулою

$$\varepsilon_{\mathbf{x}} = \mathbf{c} \phi_m(r) e^{\lambda_m t}, \quad (8.11)$$

де \mathbf{c} враховує статистичну вагу різних змінних стану. Підставляючи цей розв'язок у рівняння (8.7), приходимо до системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\lambda_m \mathbf{c} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \cdot \mathbf{c} - \mathbf{D} k_m^2 \mathbf{c}. \quad (8.12)$$

Якщо матриця \mathbf{D} має діагональний вигляд, то

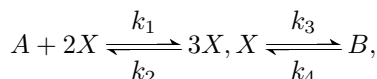
$$(\lambda_m + D_i k_m^2) c_i = \sum_i \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \cdot c_j. \quad (8.13)$$

Така система має розв'язки за умови

$$\det \left| \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} - \delta_{ij} (\lambda_m + D_i k_m^2) \right| = 0, \quad (8.14)$$

що дозволяє виразити власні значення λ_m через власні значення лапласіана k_m^2 та коефіцієнти дифузії D_i .

Випадок однієї змінної — модель Шльогля. Розглянемо реакції



що задають еволюцію концентрації у вигляді

$$\dot{x} = -k_2 x^3 + k_1 a x^2 - k_3 x + k_4 b + D \Delta x, \quad (8.15)$$

де останній член враховує дифузійне перемішування. Тоді лінійний оператор має вигляд

$$\widehat{\mathcal{L}} = (-k_2 x_0^2 + 2k_1 a x_0 - k_3) + \mathbf{D} \Delta, \quad (8.16)$$

а характеристичне рівняння зводиться до

$$\lambda_m = -k_2 x_0^2 + 2k_1 a x_0 - k_3 - D k_m^2. \quad (8.17)$$

Таким чином, λ_m — дійсне число, так що збурення розвиваються монотонно. Внесок дифузії або негативний, або дорівнює нулю, тобто дифузія не приводить до дестабілізації системи. Це означає, що нестійкість системи обумовлюється лише кінетикою, тобто задається формою функції $f(x)$. Звідси випливає, що після точки втрати стійкості новий розв'язок не буде мати власну просторову залежність.

Випадок двох змінних — бруселятор. Розглянемо тримолекулярну реакцію, в якій існують два спряжених продукти й одна автокаталітична стадія:



Вводячи у розгляд вектори

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} A - BX + X^2Y - X \\ BX - X^2Y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \end{pmatrix}, \quad (8.19)$$

приходимо до рівняння типу (8.5). Побудуємо лінійний оператор. Для цього запишемо вектор стаціонарного стану та похідну від вектор-функції \mathbf{f} :

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} A \\ B/A \end{pmatrix}, \quad \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}_0} = \begin{pmatrix} B - 1 & A^2 \\ -B & -A^2 \end{pmatrix}, \quad (8.20)$$

що дозволяє знайти лінійний оператор

$$\hat{\mathcal{L}} = \begin{pmatrix} B - 1 + D_x \Delta & A^2 \\ -B & -A^2 + D_y \Delta \end{pmatrix}. \quad (8.21)$$

Характеристичне рівняння дається за умови, коли детермінант лінеаризованої матриці зводиться до нуля, тобто

$$\begin{vmatrix} B - 1 - (D_x k_m^2 + \lambda_m) & A^2 \\ -B & -A^2 - (D_y k_m^2 + \lambda_m) \end{vmatrix} = 0, \quad (8.22)$$

або в явному вигляді

$$\begin{aligned} \lambda_m^2 - \lambda_m [B - A^2 - 1 - (D_x + D_y)k_m^2] - A^2 + \\ + [(B - 1)D_y k_m^2 + A^2 D_x k_m^2] + D_x D_y k_m^4 = 0. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Умовою наявності коливань ($\Im \lambda_m \neq 0$) при $\Re \lambda_m = 0$ є умова маргінальної стійкості

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)_{x=x_0} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)_{x=x_0} = (D_x + D_y)k_m^2, \quad (8.24)$$

яка для нашого випадку дає

$$B \equiv B_m = A^2 + 1 + (D_x + D_y)k_m^2. \quad (8.25)$$

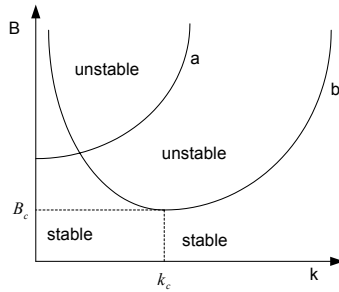


Рисунок 8.1 — Два типових результати аналізу на стійкість: а — крива маргінальної стійкості має екстремум лише при $k = 0$, тому домінуюча мода залишається просторово однорідною; б — крива маргінальної стійкості має екстремум при $k = k_c \neq 0$, тому розв'язки, що виникають, характеризуються просторовою залежністю

Власна частота коливань визначається після підстановки (8.24) у (8.14), тобто умовою

$$\omega_m^2 = (\Im\lambda_m)^2 = A^2 + [A^2 D_x - (B_m - 1)D_y]k_m^2 + D_x D_y k_m^4. \quad (8.26)$$

Таким чином, вище лінії маргінальної стійкості нові розв'язки будуть характеризуватися коливаннями з частотою ω_m і тривіальною просторовою залежністю, оскільки тут $k_m = 0$. Це досягається вибором керуючого параметра так, щоб мінімум його залежності від k_m припадав на початок координат.

У випадку наявності $\Re\lambda_m \neq 0$ умова маргінальності набуває наступного вигляду:

$$\det \left[\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} - \delta_{ij} D_i k_m^2 \right] = 0, \quad (8.27)$$

де $\lambda_m = 0$. При певному $k_{m_c} \neq 0$ може реалізуватись екстремум на залежності керуючого параметра від k_m . Це означає, що нестійка мода може мати просторову залежність. Величина $k_{m_c} \neq 0$ визначається системними параметрами, вона задає просторову хвилю збурень стаціонарного розв'язку \mathbf{x}_0 . Таким чином, за екстремальним значенням керуючого параметра збурення задає нові властивості системи, тобто генерується хвиля з власною довжиною $\lambda = 2\pi/k_{m_c}$ у системі, що вважалася однорідною. Цей ефект має назву *порушення просторової симетрії* (рис.8.1).

8.3 Хвилі перемикання [8]

Основним типом структури в простих бістабільних середовищах є *хвиля перемикання*; при її поширенні елементи середовища переходять з одного стійкого стану в інші.

Хвиля перемикання зі стану $x = x_3$ у стан $x = x_1$, що рухається зі швидкістю c , є розв'язком рівняння (8.1) у вигляді

$$x = x(\tau), \quad \tau = r - ct \quad (8.28)$$

з граничними умовами

$$x \rightarrow x_3, \quad \tau \rightarrow -\infty; \quad x \rightarrow x_1, \quad \tau \rightarrow \infty. \quad (8.29)$$

Після підстановки (8.28) у (8.1) приходимо до рівняння

$$-cx' = f(x) + Dx'', \quad (8.30)$$

де штрих відповідає похідній за τ .

Для з'ясування особливостей розв'язку введемо функцію

$$U(x) = \int^x f(x)dx, \quad (8.31)$$

та перепишемо рівняння у вигляді

$$Dx'' = -\partial U/\partial x - cx'. \quad (8.32)$$

Якщо розглядати x як координату частинки, а τ — як час, то (8.32) подається у вигляді рівняння руху частинки в потенціалі при в'язкому терті, так що швидкість хвилі виконує роль динамічної в'язкості.

Очевидно, що в точках $x = x_1$, $x = x_3$ функція $U(x)$ має максимуми, а в точці $x = x_2$ — мінімум. Припустимо, що $U(x_3) < U(x_1)$; це досягається за умови

$$A = \int_{x_1}^{x_3} f(x)dx < 0. \quad (8.33)$$

Характерно, що при швидкостях хвилі, які перевищують критичне значення c_0 , траєкторія, що стартує з точки $(x_3, 0)$ фазової площини (x, x') , потрапляє в стаціонарну точку $(x_2, 0)$, тоді як при $c < c_0$ вона потрапляє на безмежність. Стаціонарні точки $(x_1, 0)$, $(x_3, 0)$ є сідловими, а траєкторія, що виходить із них, — сепаратриса сідлової точки. Таким чином, при $c = c_0$ маємо сепаратрису, що виходить з одного сідла в інше (рис. 8.2).

Загальних методів обчислення швидкості хвилі для довільної функції $f(x)$ не існує. Для цього використовують наближені методи.

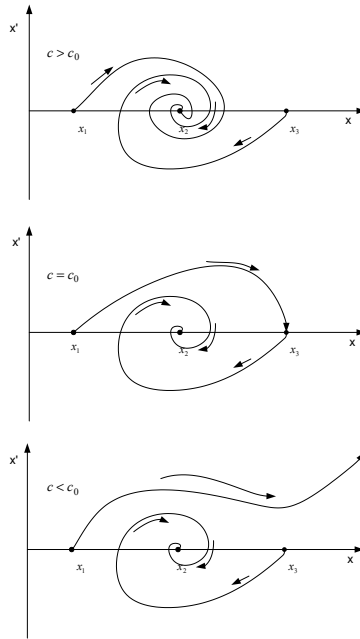


Рисунок 8.2 — Поведінка фазових траєкторій при різних швидкостях хвиль

Повільні хвилі. Якщо $A = 0$, то швидкість поширення хвилі дорівнює нулю, тобто межа поділу між областями з двома різними стаціонарними станами покоїться. При малих A швидкість зміщення межі поділу c також невелика.

Помножимо (8.30) на $dx/d\tau$ та проінтегруємо за τ у границях від $-\infty$ до ∞ . Тоді маємо

$$c \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 d\tau = \int_{x_1}^{x_3} f(x) dx. \quad (8.34)$$

Це рівняння використовується для знаходження швидкості хвилі c . Якщо $c \ll 1$, то профіль хвилі практично не відрізняється від профілю межі поділу, що покоїться $x^{(0)}(\tau)$ при $A = 0$. Підставляючи у (8.34) замість $x(\tau)$ функцію $x^{(0)}(\tau)$ та використовуючи визначення для A маємо

$$c \approx A \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx^{(0)}}{d\tau} \right)^2 d\tau \right]^{-1}. \quad (8.35)$$

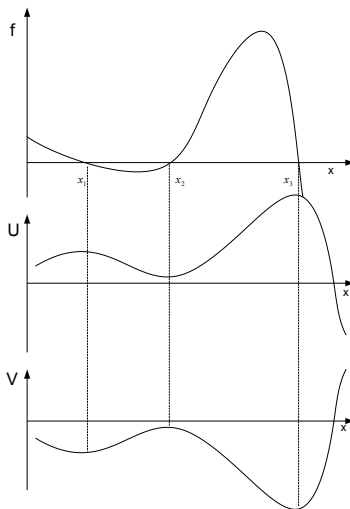


Рисунок 8.3 — Детерміністична сила $f(x)$ та потенціали $U(x)$, $V(x)$

Швидкі хвилі. Наближений метод розрахунку швидкості хвилі перемикання був запропонований у теорії теплового поширення полум'я (див. [8] та посилання там же).

Припустимо, що детерміністична сила $f(x)$ є такою, як на рис.8.3: вона є негативною та малою при $x \in (x_1, x_2)$ і великою та позитивною на відріжку $x \in (x_2, x_3)$.

У такому разі можна виділити два режими поведінки системи. На ділянці $x_2 < x < x_3$ відбувається сильний розгін, де потенціальні сила $f(x)$ надто велика у порівнянні із силою тертя cx' . Тоді можна вважати, що

$$Dx'' \approx -\partial U/\partial x. \quad (8.36)$$

Згідно з цим рівнянням повна енергія частинки зберігається:

$$\frac{D}{2}(x')^2 + U(x) = U(x_3), \quad (8.37)$$

і при $x = x_2$ швидкість досягає максимального значення

$$\left. \frac{dx}{d\tau} \right|_{x=x_2} \approx - \left\{ \frac{2}{D} [U(x_3) - U(x_2)] \right\}^{1/2}. \quad (8.38)$$

На ділянці $x_1 < x < x_2$ основну роль відіграє сила тертя, оскільки $f(x)$ стає малою. У результаті маємо

$$Dx'' \approx -cx'. \quad (8.39)$$

Безпосереднє інтегрування дає

$$x_2 - x_1 = \frac{D}{c} \frac{dx}{d\tau} \Big|_{x=x_2}. \quad (8.40)$$

Порівнюючи одержані вирази для швидкості, знаходимо

$$c = \frac{\sqrt{2D}}{x_2 - x_1} [U(x_3) - U(x_2)]^{1/2}. \quad (8.41)$$

У припущенні $x_2 \lesssim x_3$, $U(x_2) \simeq U(x_1)$ для швидкості хвилі перемикання можна записати

$$c = \frac{\sqrt{2DA}}{x_3 - x_1}. \quad (8.42)$$

8.4 Швидкість переходу із метастабільного стану [8]

При переході через критичний радіус зародка нової фази система переходить із метастабільного стану у стабільний, абсолютно однорідний стан. В одновимірному випадку форма критичного зародка з центром у точці $r = 0$ визначається розв'язанням рівняння

$$D \frac{d^2x}{dr^2} + f(x) = 0, \quad f(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (8.43)$$

за умов

$$\frac{dx}{dr} \Big|_{r=0} = 0, \quad x \rightarrow x_1 \quad \text{при} \quad |r| \rightarrow \infty, \quad (8.44)$$

де x_1 — стаціонарний нестабільний стан. Помноживши (8.43) на dx/dr та врахувавши граничні умови, маємо

$$\int_{x_1}^{x^*} f(x) dx = 0. \quad (8.45)$$

Це рівняння визначає величину $x = x^*$ у центрі зародка, причому $x^* < x_3$.

Розглянемо хвилі перемикання у двовимірному збудженому середовищі. Будь-яку хвилю зі скривленим фронтом можна розбити на малі ділянки, кожна з яких

є сегментом окружності. Знайдемо закон розподілу колового фронту, радіус R якого більший за ширину перехідного шару ℓ , $R \gg \ell$.

У полярній системі координат рівняння (8.1) набуває вигляду

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x) + \frac{D}{r} \frac{\partial x}{\partial r} + D \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}. \quad (8.46)$$

Похідна $\partial x / \partial r$ відрізняється від нуля лише на межі вузького перехідного шару $\sim \ell$ поблизу $r = R$. Оскільки $R \gg \ell$, то для другої складової можна припустити $r \approx R$.

Нехай $c(R)$ — миттєва швидкість поширення фронту з радіусом R . Такий фронт відповідає розв'язку

$$x = x(\tau), \quad \tau = r - c(R)t \quad (8.47)$$

диференціального рівняння

$$-c(R)x' = f(x) + (D/R)x' + Dx'' \quad (8.48)$$

з граничними умовами

$$x \rightarrow x_1 \quad \text{при} \quad \tau \rightarrow \infty, \quad x \rightarrow x_3 \quad \text{при} \quad \tau \rightarrow -\infty.$$

Це рівняння можна переписати у вигляді

$$-[c(R) + D/R]x' = f(x) + Dx'', \quad (8.49)$$

яке збігається з (8.30) для плоскої хвилі, якщо припустити, що $c = c(R) + D/R$; ідентичними є граничні умови. Таким чином, якщо відома швидкість поширення фронту плоскої хвилі c , швидкість поширення фронту з радіусом кривини R можна виразити як

$$c(R) = c - D/R. \quad (8.50)$$

Фронтів з $R \gg 1$ відповідають малі швидкості (опуклий фронт рухається повільніше за плоский). Області $R \ll 1$ не збільшуються, а зменшуються. В результаті встановлюється співвідношення, що характеризує критичний розмір зародка:

$$R_c = D/c. \quad (8.51)$$

Область із радіусом $R = R_c$ є критичним зародком нової фази; якщо збільшити R , то вона починає зростати, у іншому випадку вона зникає (рис.7.1). Оскільки ми врахували наближення $R \gg \ell$, то $R_c \gg \ell$. Це досягається лише при $c \ll 1$.

Аналогічним чином можна врахувати увігнутий фронт із кривизною $K = 1/R$, $K < 0$. Тоді

$$c(K) = c - DK. \quad (8.52)$$

У тривимірному випадку маємо дві кривизни K_1, K_2 . Тоді швидкість зміщення фронту задається формулою

$$c(K_1, K_2) = c - D(K_1 + K_2). \quad (8.53)$$

8.5 Збуджені середовища [8]

Для отримання бістабільного активного середовища необхідно включити механізм, який би повертав елементи системи у вихідний стан після проходження хвилі перемикавання. Для цього до системи додають інгібітор — речовину, що погіршує умови протікання хвилі перемикавання.

Тоді в загальному вигляді рівняння для активатора x мають врахувати внесок інгібітора y . В результаті можна записати

$$\begin{aligned} \tau_x \dot{x} &= f(x, y) + D_x \Delta x, \\ \dot{y} &= \varphi(y, x) + D_y \Delta y, \end{aligned} \quad (8.54)$$

де $f(x, y)$, $\varphi(y, x)$ — функції, що задають кінетику поведінки активатора та інгібітора відповідно. Вважається, що дифузія інгібітора значно мала, і далі можна припустити, що $D_y \simeq 0$, $D \equiv D_x$.

Найпростіші припущення щодо $\varphi(y, x)$ є такими: а) інгібітор виділяється як побічний продукт реакцій; б) він може розпадатися та переходити у навколишнє середовище. У рамках таких наближень маємо

$$\varphi(y, x) = \tau_y^{-1}(y_0(x) - y), \quad (8.55)$$

де $y_0(x)$ — рівноважна концентрація інгібітора, вона є зростаючою функцією x і залежить від умов середовища, може підтримуватися незмінною. Характерний час τ_y встановлення рівноважної концентрації $y_0(x)$ є набагато більшим за час встановлення імпульсу активації τ_x . Тоді y можна вважати повільною модою, а x — швидкою.

Якщо розглядати процес горіння, то швидкою модою є температура. В такому разі фронт та спад імпульсу активації утворюють дві хвилі — загоряння та гасіння, що рухаються одна за одною з однаковими швидкостями. При підвищенні температури концентрація інгібітора збільшується і процес горіння

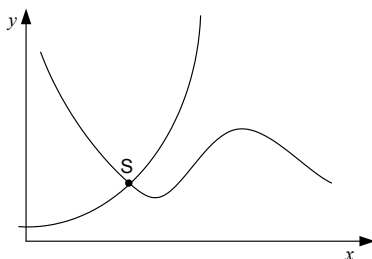


Рисунок 8.4 — Нуль-ізокліни рівнянь збудженого середовища.

зупиняється. Температура різко знижується і $y \rightarrow y_0$ — середовище переходить у вихідний стан. Далі знову можна пускати імпульс загоряння. Типовими прикладами таких систем є степові та лісові пожежі, реакція Белоусова—Жаботинського (зміна кольору речовини в лабораторних умовах), поширення імпульсу збудження уздовж нервового волокна, пластична течія матеріалів.

Таким чином, у загальному вигляді модель «активатор—інгібітор» можна записати так:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x, y) + D\Delta x, \\ \epsilon^{-1}\dot{y} &= y_0(x) - y, \end{aligned} \quad (8.56)$$

де $\epsilon \ll 1$ — малий параметр. Розглянемо випадок існування одного стаціонарного стану в системі. Це має місце у разі перетинання двох нуль-ізоклін $f(x, y) = 0$, $y_0(x) = y$ однорідної системи у єдиній точці S , що відповідає стану спокою (рис.8.4).

Використовуючи принцип адіабатичного наближення, при описі еволюції активатора x величину y можна вважати сталою. Тоді еволюція x на фронті й спаді хвилі описується першим рівнянням системи (8.56).

Задача про розрахунок одиночного рухомого імпульсу формулюється таким чином. Перейдемо до змінної $\tau = r - v_0 t$ із граничними умовами

$$x \rightarrow x_0, \quad y \rightarrow y_0, \quad \text{при} \quad \tau \rightarrow \pm\infty, \quad (8.57)$$

де (x_0, y_0) — стаціонарний однорідний стан спокою. Тоді замість (8.56) маємо

$$\begin{aligned} -v_0 x' &= f(x, y) + Dx'', \\ -(v_0/\epsilon)y' &= y_0(x) - y. \end{aligned} \quad (8.58)$$

Такий розв'язок означає наявність петлі сепаратриси стаціонарної сідлової точки S , що стає можливим за умови певного значення v_0 . За умови $\epsilon \ll 1$ стає

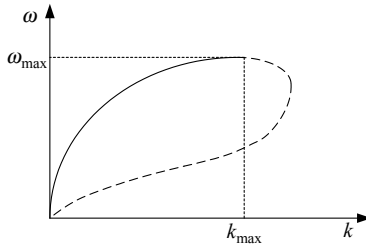


Рисунок 8.5 — Типовий вигляд закону дисперсії нелінійних періодичних хвиль збудження

можливим розвинення

$$v_0 \approx c_0(1 - \delta\epsilon), \quad \delta \simeq 1, \quad (8.59)$$

де c_0 — швидкість хвилі перемикавання, що описується першим рівнянням системи (8.56) при $y = y_0$.

Рівняння (8.56) можуть мати періодичні розв'язки — періодичне поширення імпульсів. Якщо період поширення $L \gg 1$, то швидкість руху імпульсів збігається зі швидкістю одного єдиного імпульсу. Зі зменшенням L фронт наступного імпульсу наступає на «хвіст» попереднього, і поширення фронту відбувається на фоні залишкової концентрації інгібітора, яка перевищує стаціонарний рівень y_0 . Періодична послідовність описується періодичними розв'язками

$$\begin{aligned} x &= x(\varpi), \quad y = y(\varpi), \quad \varpi = kx - \omega t, \\ x(\varpi + 2\pi) &= x(\varpi), \quad y(\varpi + 2\pi) = y(\varpi). \end{aligned} \quad (8.60)$$

У результаті приходимо до системи рівнянь

$$\begin{aligned} -\omega x' &= f(x, y) + Dk^2 x'', \\ -(\omega/\epsilon)y' &= y_0(x) - y, \end{aligned} \quad (8.61)$$

що відповідає граничному циклу цієї системи. При різному співвідношенні ω та k період такого циклу за фазовою координатою може бути різним. Якщо вимагати, щоб він дорівнював 2π , то одержуємо зв'язок між ω та k , який має назву *закону дисперсії* нелінійних періодичних хвиль $\omega = \omega(k, \epsilon)$. Типова форма закону дисперсії зображена на рис.8.5, де штрихова крива описує повільні хвилі і відповідає нестійким режимам. Суцільна лінія описує швидкі хвилі. Існує мі-

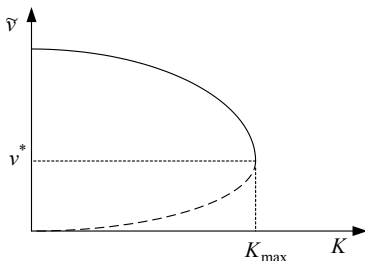


Рисунок 8.6 — Залежність швидкості поширення хвилі у двовимірному збудженому середовищі від кривизни фронту

німальний просторовий період $L_{\min} = 2\pi/k_{\max}$, що по порядку величини дорівнює ширині окремого імпульсу збудження. Йому відповідає максимальна частота поширення $\omega_{\max} \propto \epsilon^{1/2}$.

Розглянемо двовимірне середовище, що збуджується, де одиночному імпульсу відповідає одиночна хвиля збудження. Для цього введемо кривизну фронту $K = 1/R$, вважаючи, що фронт описується окружністю радіусом R . Тоді у припущенні малості ширини хвилі ℓ , $R \gg \ell$ у полярній системі координат рівняння мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= f(x, y) + \frac{D}{r} \frac{\partial x}{\partial r} + D \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \epsilon^{-1} \frac{\partial y}{\partial t} &= y_0(x) - y. \end{aligned} \quad (8.62)$$

Переходячи до системи координат $\tau = r - \tilde{v}t$, одержуємо

$$\begin{aligned} -(\tilde{v} + DK)x' &= f(x, y) + Dx'', \\ -(\tilde{v}/\epsilon)y' &= y_0(x) - y. \end{aligned} \quad (8.63)$$

Одержана система збігається із системою (8.58), якщо провести заміну $v^* = \tilde{v} + DK$, $\epsilon^* = (\tilde{v} + DK)\epsilon/\tilde{v}$. Тоді v^* виражається через ϵ^* за законом (8.59). Безпосередня підстановка дає

$$\frac{\tilde{v}}{c_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \delta\epsilon - \frac{DK}{c_0} \right) \pm \frac{1}{2} \left[\left(1 - \delta\epsilon - \frac{DK}{c_0} \right)^2 - 4\delta\epsilon \frac{DK}{c_0} \right]^{1/2}. \quad (8.64)$$

Ніякі хвилі не можуть поширюватися з кривизною, більшою за

$$K_{\max} = \frac{c_0}{D} [1 - 2\sqrt{\delta\epsilon}]. \quad (8.65)$$

При $K < K_{\max}$ у системі можливі дві хвилі, одна з яких є нестійкою (штрихова лінія на рис.8.6).

Зробимо порівняння руху хвиль перемикавання у бістабільних системах і хвиль у збудженому середовищі. Швидкість хвилі перемикавання $c = c_0 - DK$. При великій кривизні фронт може зупинитися й розпочати рух у зворотному напрямку. Для хвиль перемикавання це є неможливим, оскільки при підвищенні кривизни хвиля втрачає стійкість і руйнується. При наближенні до K_{\max} хвилі рухаються з швидкістю $\tilde{v} = \sqrt{\delta\epsilon}$.

Розділ 9

Теорія ієрархічного зв'язку [16]

При значному відхиленні від рівноваги система втрачає ергодичність, її фазовий простір розбивається на кластери, які відповідають структурним рівням, що підпорядковані один одному ієрархічно. Відомо, що ієрархічно підпорядковані системи утворюють ультраметричний простір, геометричним образом є дерево Кейлі. Ступінь ієрархічного зв'язку w об'єктів, що відповідають вузлам

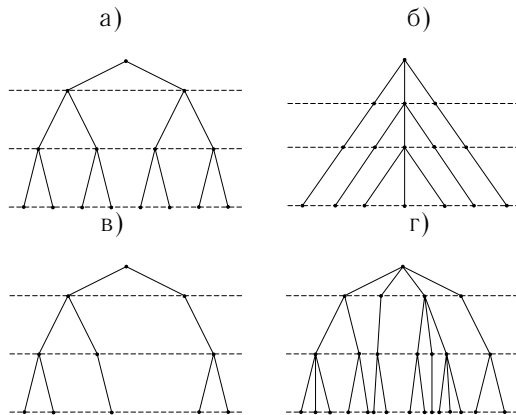


Рисунок 9.1 — Основні типи ієрархічних дерев: а) регулярне дерево; б) вироджене дерево; в) дерево Фібоначчі; г) нерегулярне дерево

дерева на даному ієрархічному рівні, визначається числом кроків ℓ до спільного предка, що задає відстань в ультраметричному просторі. Визначимо вигляд $w(\ell)$ для різних дерев.

9.1 Населеність ієрархічного рівня

Нехай ієрархічний об'єкт на рівні n характеризується густиною ймовірності P_n , яка зростає при переході на вищий рівень $n - 1$, тобто

$$P_{n-1} = P_n + N_n^{-1}w(P_n), \quad (9.1)$$

N_n — число вузлів дерева на рівні n . Для регулярного дерева

$$N_n = s^n, \quad (9.2)$$

де s — кількість гілок, що проростають з одного вузла. У випадку наведеного регулярного дерева $s = 2$. Для виродженого дерева кожен рівень містить лише один вузол, з якого проростають інші гілки, отже, маємо лінійне співвідношення

$$N_n = (s - 1)n + 1 \approx sn, \quad s \gg 1. \quad (9.3)$$

Для дерева Фібоначчі маємо $N_n = F(n + 2)$, де $F(n)$ — числа Фібоначчі, для яких $F(n + 2) = F(n + 1) + F(n)$, $F(1) = F(2) = 1$. При $n \gg 1$ одержуємо $F(n + 2) \simeq f\tau^n$, $f \simeq 1.17082$, $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2 \simeq 1.61803$. Тому приходимо до апроксимації

$$N_n \simeq f\tau^n, \quad n \gg 1. \quad (9.4)$$

У загальному вигляді можна припустити, що для нерегулярного дерева застосовується така апроксимація:

$$N_n = \nu n^a, \quad \nu > 0. \quad (9.5)$$

9.2 Властивість самоподібності ієрархічних систем

Рівняння (9.1) має властивість самоподібності, що задає основу ієрархічних систем. Дійсно, припустивши, що густина ймовірності $P_n \sim q^n$, де $q < 1$ — параметр подібності, а функція зв'язку є такою, що задовольняє умову однорідності $w(qP) = q^\beta w(P)$, із (9.1) та (9.2) при $n \gg 1$, $P_{n-1} \sim P_n$ одержуємо зв'язок

$$\beta = 1 - D, \quad D \equiv \frac{\ln s}{\ln q^{-1}} \quad (9.6)$$

між показником β фізичної характеристики та фрактальною вимірністю $D \leq 1$ самоподібного об'єкта. Зазначимо, що умова $qP = 1$ дає асимптотику

$$w(P) = WP^\beta, \quad P \rightarrow 0, \quad W \equiv w(1). \quad (9.7)$$

Якщо припустити, що в (9.1) та (9.2) при довільних значеннях P_n виконується скейлінгове співвідношення

$$P_n = x^n q^n \equiv x_n s^{-n/D}, \quad (9.8)$$

приходимо до скінченно-різницевого рівняння для x_n

$$x_{n-1} = \underbrace{q(x_n + Wx_n^{1-D})}_{\varphi(x_n)}, \quad q \equiv s^{-1/D}. \quad (9.9)$$

Відображення $\varphi(x_n)$ характеризується двома стаціонарними точками

$$x = 0, \quad x_c = \left(\frac{W}{q^{-1} - 1} \right). \quad (9.10)$$

У результаті приходимо до виразів

$$P_n = x_c s^{-n/D}, \quad (9.11)$$

$$w_n = W^{1/D} (q^{-1} - 1)^{-\Delta} s^{-\Delta n}, \quad \Delta = \frac{1 - D}{D}, \quad (9.12)$$

де величина Δ визначає масштаб ієрархічного зв'язку в ультраметричному просторі.

У континуальній границі $n \rightarrow \infty$ можна припустити $P_n - P_{n-1} = dP/dn$. Тоді рівняння (9.1) набуває вигляду

$$\int \frac{dP}{w(P)} = - \int \frac{dn}{N_n} \equiv \frac{1}{\ln s} \int \frac{d\lambda}{N(\lambda)}, \quad (9.13)$$

$$\lambda \equiv (n_0 - n) \ln s, \quad n \leq n_0, \quad (9.14)$$

де λ — відстань в ультраметричному просторі; $n_0 \gg 1$ — повне число ієрархічних рівнів. Оскільки основний внесок у це рівняння дає область малих P , то можна застосувати асимптотику $w(P) = WP^{1-D}$, і для визначених N_n розв'язок знаходиться аналітично.

Регулярне дерево та дерево Фібоначчі. Skorиставшись виразами для регулярного дерева, одержуємо

$$P = W^{-1/(1-D)} [(1 - u) + ue^{\lambda - \lambda_0}]^{1/D}, \quad u \equiv DW^{1/(1-D)} / \ln s, \quad \lambda_0 \equiv n_0 \ln s; \quad (9.15)$$

$$w = [(1 - u) + ue^{\lambda - \lambda_0}]^\Delta, \quad \lambda \leq \lambda_0, \quad w(\lambda_0) = 1. \quad (9.16)$$

Таким чином, із зростанням відстані до загального предка $P(\lambda)$ та $w(\lambda)$ зростають експоненційно з інкрементами D^{-1} та Δ відповідно. $\Delta = 0$ при $D = 1$, тобто коли система має ідеальний ієрархічний зв'язок. Ці інкременти необмежено зростають при $D \rightarrow 0$.

У рамках континуального наближення скінченно-різницевого рівняння для x записується у формі

$$\frac{dx_n}{dn} = - \frac{\partial V}{\partial x_n}, \quad (9.17)$$

де синергетичний потенціал має вигляд

$$V = -\frac{x^2}{2} + \int \varphi(x) dx = \frac{Wq}{2-D} x^{2-D} - \frac{1-q}{2} x^2. \quad (9.18)$$

Як видно з рис.9.2, при докритичних значеннях $x < x_c$ потенціал зростає до V_0 , далі спадає. Тобто ієрархічна система є нестійкою до збільшення рівнів, якщо початкове значення інтенсивності x_0 перевищує критичне x_c . Цей факт відомий як самовідтворення бюрократичної системи. Розв'язок рівняння (9.17) дає

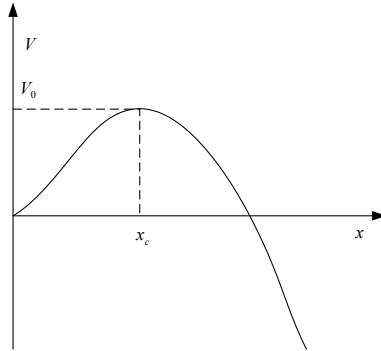


Рисунок 9.2 — Типова форма синергетичного потенціалу $V(x)$

$$P_n = \left[P_0^D - x_c^D \left(1 - e^{-D(1-q)n} \right) \right]^{1/D} e^{n(1-q+\ln q)}, \quad (9.19)$$

яке збігається з попереднім результатом при $\ln \ll D$, що означає $\ln s \simeq s - 1$, $\ln q \simeq q - 1$.

Для дерева Фібоначчі параметри s та W замінюємо на τ та W/f . Тоді $D = \ln \tau / \ln 2 \simeq 0.6942$.

Вироджене дерево. У такому випадку легко одержати вирази

$$P = W^{-1/(1-D)} \left[1 - u \ln \left(1 + \frac{s-1}{\ln s} (\lambda_0 - \lambda) \right) \right]^{1/D}, \quad u \equiv \frac{DW^{1/(1-D)}}{s-1}, \quad (9.20)$$

$$w = \left[1 - u \ln \left(1 + \frac{s-1}{\ln s} (\lambda_0 - \lambda) \right) \right]^\Delta. \quad (9.21)$$

У порівнянні з попереднім випадком видно, що експоненційні залежності замінюються логарифмічними.

Нерегулярне дерево. Якщо кількість вузлів на певному рівні подається степеним зростанням, то

$$P = W^{-1/(1-D)} [1 + u(1 - \lambda/\lambda_0)^{1-a}]^{1/D}, \quad u \equiv \frac{DW^{1/(1-D)}n_0^{1-a}}{\nu(a-1)}, \quad (9.22)$$

$$w = [1 + u(1 - \lambda/\lambda_0)^{1-a}]^\Delta. \quad (9.23)$$

Таким чином, для нерегулярного дерева маємо степеневий закон зростання ієрархічного зв'язку.

9.3 Властивості ієрархічного зв'язку

З проведеного аналізу випливає, що характеристики ієрархічності системи P та w спадають із зростанням відстані в ультраметричному просторі λ при переході на вищий рівень ієрархії. Для регулярних дерев експоненційна поведінка означає зв'язок обмеженої кількості рівнів, яка складає

$$\kappa = (\Delta \ln s)^{-1} = D[(D-1) \ln s]^{-1}. \quad (9.24)$$

Тому регулярні дерева задають слабкий ієрархічний зв'язок. Особливе місце відводиться системам з $D = 1$, де $\kappa = \infty$ — тоталітарна ієрархія (ієрархічний зв'язок є ідеальним). Однак інтенсивність ієрархічних об'єктів спадає так само експоненційно на відстанях $\lambda = D = 1$, тобто навіть ідеальне підпорядкування приречене на нульову ефективність.

В нерегулярних деревах (найпоширеніших) ієрархічний зв'язок спадає степеневим чином. Найповільніше спадання відповідає логарифмічній особливості, яка характеризує вироджене дерево Кейлі. Такий спосіб властивий системі відбору. Наведеним випадкам відповідає сильний ієрархічний зв'язок, який спостерігається між всіма рівнями ієрархії, тоді параметр Δ визначає не глибину зв'язку, а швидкість її затухання. Так, при $D = 1$ маємо $\Delta = 0$ та ієрархічний зв'язок не затухає, однак P спадає з показником $D^{-1} = 1$.

Загалом у нестационарних системах параметр подібності q стає функцією часу, тому змінюється величина $D(q)$. Окрім того, для складних систем ієрархічний зв'язок має мультифрактальний характер, так що суттєву роль відіграє не одне значення q , а його спектр $q \in (-\infty, \infty)$, за яким сила зв'язку $w_q(\lambda)$

розподілена з густиною $\rho(q)$. У результаті її повне значення визначається інтегралом

$$w(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} w_q(\lambda)\rho(q)dq, \quad (9.25)$$

де у виразах для $w(\lambda)$ слід замінити $D \rightarrow D(q)$. Визначення вигляду $D(q)$ та $\rho(q)$, що задають мультифрактал, є окремою задачею.

Список літератури

1. Николіс Дж., Пригожин І. Самоорганізація в неравновесных системах и устройствах. — М.: Мир, 1979. — 512 с.
2. Хакен Г. Синергетика. — М.: Мир, 1980. — 404 с.
3. Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей. — М.: Мир, 1985. — 423 с.
4. Николіс Дж. Динамика иерархических систем. — М.: Мир, 1989. — 488 с.
5. Николіс Дж., Пригожин І. Познание сложного. — М.: Мир, 1990. — 344 с.
6. Хакен Г. Информация и самоорганизация. — М.: Мир, 1991. — 240 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. — М.: Наука, 1976. — Ч.І. — 584 с.
8. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. — М.: Мир, 1990. — 272 с.
9. Шустер Г. Детерминированный хаос. — М.: Мир, 1979. — 253 с.
10. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. — М.: Мир, 1984. — Ч.І. — 350 с.
11. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей. — М.: Наука, 1969. — 400 с.
12. Олемской А.И., Хоменко А.В. Синергетика конденсированной среды. — Суми: Видавництво СумДУ, 2002. — 372 с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979. — 528 с.
14. A.I.Olemskoi. Theory of Structure Transformations in Non-Equilibrium Condensed Matter — New-York, NOVA Science, 1999. — 350 p.
15. Пригожин І. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. — М.: Мир, 1973. — 323 с.
16. Olemskoi A.I., Kiselev A.D. Theory of hierarchical coupling // Phys.Lett. A, 1998, **247**, P.221–225.

Навчальне видання

Харченко Дмитро Олегович

ПОДАННЯ СИНЕРГЕТИЧНИХ СИСТЕМ

Конспект лекцій для студентів механіко-математичного та фізико-технічного напрямків усіх спеціальностей денної форми навчання

Відповідальний редактор С.М.Симоненко
Редактор Т.Г.Чернишова

План 2003 р., поз.

Підп. до друку Формат 60×84/16. Умовн.друк. арк.
Наклад 50 прим. Замовл. № Обл.-вид.арк.
Безкоштовно.

Видавництво СумДУ. Р.с. № 34 від 11.04.2000р.
40007, Суми, вул. Римського-Корсакова, 2

Друкарня СумДУ. 40007, Суми, вул. Римського-Корсакова, 2