

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ**

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М. Горького»

Физический факультет

Кафедра общей и молекулярной физики

**Термодинамика нелинейных биологических процессов. Переход к хаосу**

---

Программа специальной дисциплины  
(Стандарт ПД.СД/ДС)

Екатеринбург

2008

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета \_\_\_\_\_ А.Н.Бабушкин

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2008 года

Программа дисциплины “Термодинамика нелинейных биологических процессов. Переход к хаосу” составлена в соответствии с требованиями регионального компонента к обязательному минимуму содержания и уровню подготовки студентов по специальности 010700 «Медицинская физика»

---

по циклу СД/ДС дисциплин государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования.

Семестр 7

Общая трудоемкость дисциплины 100 часов, в том числе:

Лекций 36

Контрольные работы 12

Консультации 6

Экзамен 5

Подготовка к занятиям 36

Отчетность: Экзамен (теоретический курс) - 7 семестр

Контрольные мероприятия: коллоквиум

Разработчик программы Быстрой Г.П. к.ф.м.н., Доцент, профессор КОМФ

Контрольные мероприятия:

Сдача контрольных работ - 1

Зачет (теоретический курс)

Автор (составитель, разработчик)

Быстрой Г.П. к.ф.м.н., Доцент, профессор кафедры общей и молекулярной физики, УрГУ

Рекомендовано к печати протоколом заседания кафедры общей и молекулярной физики от 10 октября 2007 № 10.

(С) Уральский государственный университет

(С) Быстрой Г.П., 2008

## **I. Введение**

1. *Цель дисциплины* - сформировать у студентов современное представление о локально-равновесной и локально-неравновесной термодинамике, термодинамике нелинейных биологических процессов (переход к хаосу), а также об основных проблемах, стоящих перед термодинамикой открытых систем.

2. *Задача дисциплины* - на основе современных методов теоретической физики, дать представления об особенностях описания неравновесных процессов и перехода к хаосу в открытых системах.

3. *Место дисциплины в системе высшего профессионального образования*. Дисциплина является одной из завершающих подготовку на уровне бакалавриата по специализации «Медицинская физика». В связи с этим при ее изучении используются знания и навыки, полученные студентами при изучении курсов общей и теоретической физики и предшествующих курсов специальных дисциплин по специализации «Теплофизика и молекулярная физика».

4. *Требования к уровню освоения содержания курса (приобретаемые компетенции, знания, умения, навыки)*. Научить студентов работе со специальной литературой и применению теоретических знаний к интерпретации результатов экспериментальных и теоретических исследований применительно к неравновесным открытым биологическим системам. Освоить специфику и алгоритм решения нелинейных задач в открытых биологических системах.

В курсе рассматриваются основные понятия неравновесной термодинамики. Идеи, методы и результаты термодинамики являются фундаментом педагогической и научной деятельности специалистов разного профиля – физиков и математиков, химиков и биологов.

Излагается формальный аппарат феноменологической термодинамики локально-равновесных и локально-неравновесных процессов (ТНП), осно-

ванный на трех основных теоремах, которые строго доказываются в рамках метода функций Ляпунова и принципа минимальности термодинамических потенциалов в состоянии равновесия.

Для построения обобщенной формализованной модели термодинамики открытых систем используется принцип устойчивости по Ляпунову: для уравнений Онзагера (уравнений возмущенного движения) находится функция Ляпунова. Рассмотрение ведется как для локально-равновесных процессов переноса, приводящих к параболическим уравнениям переноса, так и локально-неравновесных процессов, приводящих к уравнениям переноса гиперболического типа. Данный подход применен для построения полезных нелинейных моделей в нелинейной биофизике, в том числе описывающих флуктуации (хаос) и необратимость через показатели Ляпунова и энтропию Колмогорова.

В курсе лекций обсуждаются основные постулаты линейной и нелинейной неравновесной термодинамики и следствия, к которым они приводят. Современное развитие неравновесной термодинамики биологических процессов связано с изучением самоорганизации, диссипативных структур и перехода к хаосу. Даются основные понятия теории катастроф и теории детерминированного хаоса. Описываются и обсуждаются основные свойства регулярных и хаотических решений в некоторых типичных задачах биофизики. Обсуждается проблема описания локальной и глобальной устойчивости нелинейных термодинамических систем. Дается обоснование возможности существования неперiodических режимов колебаний в детерминированных термодинамических системах. Приводится определение детерминированного хаоса и обсуждаются его свойства, в том числе для описания гомофазных и гетерофазных флуктуаций.

Студенты знакомятся с методиками решения нелинейных дифференциальных уравнений, алгоритмами построения бифуркационных диаграмм, вычисления показателей Ляпунова и энтропии Колмогорова для отображений,

имеющих непосредственное отношение к термодинамике фазовых переходов.

Спецкурс сопровождается практическими работами студентов на ПК по специальным заданиям. Задания охватывают все основные вопросы программы.

Спецкурс предназначен для студентов старших курсов физических специальностей университетов, специализирующихся по молекулярной физике, теплофизике и физике открытых систем в качестве дополнительного материала при изучении раздела Термодинамика.

## **II. Содержание курса**

### **1. Разделы курса, темы, их краткое содержание**

#### **Раздел I. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ ТЕРМАДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ**

1. Первый закон термодинамики неравновесных процессов (ТНП) для открытых систем. Исходные принципы построения ТНП в открытых системах: принцип минимума термодинамического потенциала, принцип Ле-Шателье, принцип устойчивости по Ляпунову. Расширенный принцип локального неравновесия. Функции состояния в ТНП. Уравнение сохранения энергии для уравнений возмущенного движения. Термодинамические потоки и силы. Уравнения возмущенного движения для неравновесных систем (уравнения Онзагера). Принцип симметрии коэффициентов Онзагера. Нестационарные уравнения Онзагера. Получение из ТНП основных термодинамических уравнений для равновесных процессов.

2. Второй закон термодинамики неравновесных процессов для открытых систем. Функция Ляпунова для уравнений возмущенного движения. Теорема Ляпунова и ее применение в ТНП. Рост энтропии в изолированных системах, как проявление устойчивости по Ляпунову на бесконечном интервале времени. Увеличение и уменьшение энтропии для открытых систем.

3. Теорема Пригожина о минимуме производства энтропии для линейных процессов, ее недостатки и ограничения. Третий закон термодинамики неравновесных процессов для открытых систем. Доказательство теоремы Пригожина для линейных неравновесных процессов при постоянных граничных условиях. Нарушение теоремы Пригожина при изменяемых граничных условиях. Нарушение теоремы Пригожина для нелинейных систем в связи с неединственностью стационарных состояний для нелинейных систем. Переход к теории катастроф.

4. Решение проблемы термодинамических неравенств. Тождества неравновесной термодинамики и доказательство неравенств.

5. Доказательство основных неравенств термодинамики неравновесных процессов на основе второго метода Ляпунова.

6. Термодинамика систем с инверсной заселенностью верхнего уровня.

## Раздел II. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

1. Динамический подход в моделировании нелинейных процессов. Описание динамики линейных и нелинейных систем.

2. Соответствие между нелинейной моделью и II законом термодинамики.

3. Устойчивость нелинейных термодинамических систем.

4. Термодинамика нелинейных процессов. Анализ скорости изменения энтропии и свободной энергии.

5. Как связаны метод Тома определения устойчивости состояний со вторым методом Ляпунова.

6. Коэффициент эффективности энергетических превращений в нелинейных системах.

## Раздел III. ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА (НА ПРИМЕРЕ ДИФФУЗИИ)

1. Термодинамическое обоснование параболического уравнения переноса вещества.
2. Локально-неравновесные процессы переноса. Локально-неравновесная термодинамика.
3. Гиперболическое уравнение диффузии с притоком вещества.

#### Раздел IV. ПЕРЕХОД К ХАОСУ: ТЕРМОДИНАМИКА ХАОТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

1. Переход от релаксационных уравнений локально-неравновесных систем к уравнениям второго порядка.
2. Дифференциальное уравнение второго порядка с релаксацией и с последствием. Возникновение хаоса.
3. Сжатие фазового объема. Диссипативность локально-неравновесной термодинамической системы.
4. Показатели Ляпунова.
5. Энтропия Колмогорова.
6. Переход от непрерывных термодинамических уравнений к дискретным (отображениям).
7. Бифуркационные диаграммы.
8. Хаос и необратимость.

#### Раздел V. ХАОТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИНАМИКИ ТОКА В ОДИНОЧНЫХ ИОННЫХ $K^+$ -КАНАЛАХ

1. Описание моделей.
2. Хаотическая динамика параметра порядка в ионном канале биомембраны.
3. Показатели Ляпунова.
4. Время, за которое система забывает начальные условия.
5. Карта динамических режимов.
6. Функция распределения хаотических пульсаций.

7. Спектры мощности пульсаций.
8. Метод Херста (R/S-анализ).
9. Фрактальная размерность.

Раздел VI. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
САМООРГАНИЗУЮЩЕГОСЯ САРКОМЕРА С ХАОТИЧЕСКОЙ  
ДИНАМИКОЙ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

1. Динамика линейного сокращения саркомера.
2. Динамика нелинейного сокращения саркомера.
3. Пульсации температуры.

Раздел VII. ВОЗНИКНОВЕНИЕ САМОВОЗБУЖДЕНИЯ И ЕГО  
ОПИСАНИЕ В СИСТЕМЕ САРКОМЕР-РАСТВОР

1. Цикл реакций, проходящих в системе саркомер-раствор.
2. Кинетические уравнения и результаты их численного решения.

Раздел VIII. ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА  
СКЕЛЕТНЫХ МЫШЦ ЧЕЛОВЕКА С ГОМО- И ГЕТЕРОГЕННЫМ  
ХАОСОМ

1. Основные нелинейные характеристики.
2. Базовая модель.

# 1. Сборник задач

## Задачи к главе 1

Одной из наиболее привлекательных черт термодинамического метода всегда была возможность получения глубоких по содержанию следствий на основе небольшого числа первичных принципов. В предлагаемых задачах все эти следствия имеют четкую формулировку и доказываются.

**Задача 1.1.** Докажите, что реальные процессы при фиксированных граничных условиях протекают в направлении уменьшения свободной энергии  $F$  до тех пор, пока свободная энергия не достигнет минимума в устойчивом равновесном состоянии.

**Задача 1.2.** Переходя к дифференциалам, вводя термодинамический потенциал внешней среды  $\Lambda_e$ , а также  $\Lambda^F = F - F_0$  – термодинамический потенциал неравновесной системы, докажите результат, полученный А.Б. Рубиным [11]  $Td_i S = -d(\Lambda^F + \Lambda_e)$  (записан в наших обозначениях).

**Задача 1.3.** Покажите, что скорость продуцирования энтропии, или диссипации энергии согласно (1.18), в единицу времени равна [11]

$$\beta = T \frac{d_i S}{dt} = -\frac{\Delta \Lambda_e}{\tau_0}.$$

**Задача 1.4.** Докажите, что если имеются две системы, для которых  $\Delta \Lambda_1^* = \Delta \Lambda_2^*$ , то из (1.19) при  $\tau_1 < \tau_2$  следует что  $\beta_1 > \beta_2$ , т.е. скорость диссипации энергии в первом цикле больше, чем во втором, при том же значении совершенной работы. (задача Т. Мицунойя (1959) [11]).

**Задача 1.5.** Покажите, что уменьшение энтропии для открытой системы является неустойчивым по Ляпунову процессом, т.е. оно не выполняется на бесконечном интервале времени.

**Задача 1.6.** Докажите, что приращение энтропии при неравновесном процессе больше, чем при равновесном

$$T \frac{dS}{dt} \geq \frac{dU_0}{dt} + P \frac{dV}{dt}.$$

## Задачи к главе 2

**Задача 2.1.** Используя литературу (см., например, [7]) опишите катастрофу складки, подразумевая, выполнимость следующей модели:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial x}, \quad G(x, a) = \frac{1}{3}x^3 + ax.$$

Определите устойчивость состояния системы. Дайте графическую и физическую интерпретацию функции  $G(x, a)$ .

**Задача 2.2.** Покажите, что коэффициент эффективности энергетических/энтропийных превращений для нелинейных процессов может быть определен по уравнению

$$\phi = -\frac{cy - c_1(cy)^2 + c_2(cy)^3 - b_1}{1/cy - b_2}. \quad (2.12)$$

**Задача 2.3.** Покажите, что в стационарном состоянии величина  $\chi_{st}$  связана с коэффициентом энергетических превращений  $\phi$ :  $\infty > \chi_{st} = 1/\phi \geq 1$ ,  $0 < \phi \leq 1$ .

**Задача 2.4.** Определите решения для уравнения  $d\eta/dt = -(\eta^3 + a^*\eta + b^*)$ , задав параметры и начальное условие. Введите шум, изменяющийся по гармоническому закону. Постройте спектр хаотических пульсаций решений.

## Задачи к главе 3

**Задача.3.1.** В параболическом уравнении теплопроводности с нелинейным тепловым источником

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\nabla^2 T + \beta T - \alpha T^3, \quad (3.14)$$

определите скорость изменения энтропии и производство энтропии, скорость изменения свободной энергии, функцию Релея. Найдите также вторые производные указанных термодинамических параметров, а также запишите вариационный принцип для этого уравнения.

**Задача 3.2.** Считая уравнения (4.5) нестационарными уравнениям переноса в локально неравновесных системах сформулируйте и докажите для них теорему 1 для устойчивых по Ляпунову процессов.

**Задача 3.3.** Определить производство энтропии и скорость изменения энтропии для локально неравновесных процессов, описываемых гиперболическим уравнением с нелинейным тепловым источником

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \nabla^2 T + \beta T - \alpha T^3.$$

#### Задачи к главе 4

**Задача 4.1.** Составьте алгоритм решения уравнения (4.7), которое следует представить в виде системы трех нелинейных дифференциальных уравнений – автономной системы уравнений (4.8). Получите результаты, приведенные на рис. 4.1, или близкие к ним. Проведите статистический анализ гомофазных и гетерофазных флуктуаций внутренней термодинамической силы (а) (параметра порядка), фазовый портрет (б).

**Задача 4.2.** Используя решения уравнения (4.7) определите хаотическую динамику скорости изменения энтропии  $G^*$ , т.е. то, что представлено на рис. 4.2 (а,б). Как ведет при этом параметр порядка  $\eta$  (в)?

**Задача 4.3.** Найдите хаотические решения, приведенные на рис. 5.3. и эволюцию “расстояния” между двумя расчетными траекториями уравнения (4.7) при заданных отличающихся начальных условиях. Расстояние между двумя соседними траекториями  $\eta(t)'$  и  $\eta(t)''$  задайте величиной  $\delta\eta(t) = |\eta(t)' - \eta(t)''|$ , определите  $t_r$  – характерное время, за которое система забывает начальные условия.

**Задача 4.4.** Научитесь строить псевдофазовые портреты решений уравнения (5.7) для любых произвольно заданных  $\Delta$ ; получите частные решения, приведенные на рис.4.4.

**Задача 4.5.** Постройте алгоритм получения хаотической динамики параметра порядка и показателя Ляпунова  $\lambda$  для термодинамической систе-

мы, описываемой отображением (4.14), который приводит к результату, приведенному на рис. 4.5.

**Задача 4.6.** Постройте бифуркационную диаграмму  $\eta = \eta(a^*)$  для отображения сборки (4.14) в интервале  $-1.6 < a^* < 0.1$ .

**Задача 4.7.** Найдите решения для отображения Хенона. Определите показатели Ляпунова.

### Задачи к главе 5.

**Задача 5.1.** Найдите решения отображения сборки для показателя Ляпунова  $\lambda < 0$ .

**Задача 5.2.** Найдите решения отображения сборки для показателя Ляпунова  $\lambda > 0$ .

### Задачи к главе 6.

**Задача 6.1.** Найдите решение для странного аттрактора Реслера.

**Задача 6.2.** При указанных ниже параметров найдите решения аттрактора Лоренца:  $\sigma = 7, r = 28, b = 8/3$ .

### Задачи к главе 7

**Задача 7.1.** Составить к схеме цикла реакций (7.1)-(7.7) соответствующие кинетические уравнения. Предложить алгоритм их решений при различных константах реакций  $k_i$  и  $k'_i$ . Получите результаты, приведенные на рис. 7.1-7.2, или близкие к ним. Проведите анализ полученных результатов.

**Задача 7.2.** Найдите эволюцию “расстояния” между двумя расчетными траекториями кинетических уравнений.

**Задача 7.3.** Построить псевдофазовые портреты решений кинетических уравнений для любых произвольно заданных  $\Delta$ ; получите частные решения, приведенные на рис. 7.4.

## Задачи к глава 8

**Задача 8.1.** Используя отображение сборки разработайте модель шагающего в норме человека (без патологий)? Внешний управляющий параметр  $b^*$ .

Все ссылки на формулы приводятся на учебное пособие Быстрая Г.П.

### III. Распределение часов курса по разделам программы

№ п/ п	Наименование разделов и тем	ВСЕГ О (часов)	Аудиторные занятия (час)		Само- стоя- тельная работа
			в том числе		
			Лек- ции	Практиче- ские (Кон- трольные работы)	
1	Раздел I. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ ТЕРМАДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ		5	0	8
2	Раздел II. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ		5	0	8
	Раздел III. ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА (НА ПРИМЕРЕ ДИФФУЗИИ)		4	0	8
	Раздел IV. ПЕРЕХОД К ХАОСУ: ТЕРМОДИНАМИКА ХАОТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ		5	0	8

Раздел V. ХАОТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИНАМИКИ ТОКА В ОДИНОЧНЫХ ИОННЫХ $K^+$ -КАНАЛАХ		4		8
Раздел VI. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМООРГАНИЗУЮЩЕГОСЯ САРКОМЕРА С ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКОЙ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА		5		8
Раздел VII. ВОЗНИКНОВЕНИЕ САМОВОЗБУЖДЕНИЯ И ЕГО ОПИСАНИЕ В СИСТЕМЕ САРКОМЕР-РАСТВОР		4		8
Раздел VIII. ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА СКЕЛЕТНЫХ МЫШЦ ЧЕЛОВЕКА С ГОМО- И ГЕТЕРОГЕННЫМ ХАОСОМ		4		8
ИТОГО:	100	36	0	64

#### IV. Учебно-методическое обеспечение курса

##### Рекомендуемая литература (основная)

1. Рубин А.Б. Биофизика. Т. 1,2. Учебник для вузов. 2-е изд.-М.: Книжный дом университет, 1999.
2. Базаров И.П. Термодинамика. М.: Высшая школа. 1983.
3. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. Т. 1. М.: Янус-К. 1999.
4. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1973.

5. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного . М.: Мир, 1990.
6. Быстрой Г.П. Термодинамика открытых систем: учеб. Пособие (гриф УМО). - Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2007.
7. Кеплен С.Р., Эссиг Э. Биоэнергетика и линейная термодинамика необратимых процессов.- М.: Мир, 1986/

#### Рекомендуемая литература (дополнительная)

1. Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение. М.: Мир. 1988
2. Кольцова Э.М., Третьяков Ю.Д., Гордеев Л.С. и др. Нелинейная динамика и термодинамика необратимых процессов в химии и химической технологии. М.: Химия, 2001. С. 408.
3. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. М.: Мир.. 1984. Т.1. Т.2.
4. Кузнецов С.П. Динамический хаос. М.: Изд-во ФМЛ. 2001.

#### V. Ресурсное обеспечение

1. Компьютерный класс с ПК.
2. Программные продукты по решению задач в Mathcad.