

Г. П. Быстрой, С. А. Охотников

ОДИН ИЗ ПОДХОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ

Излагается термодинамика нелинейных процессов, в которой рассматриваются основные (базовые) термодинамические уравнения первого уровня — релаксационные локальные уравнения для термодинамических сил и потоков. Формулируется и доказывается теорема, которая является аналогом теоремы Пригожина для нелинейных систем и связана с дрейфом/диффузией к локальному/глобальному минимуму и структурной устойчивостью исследуемых нелинейных систем. Приводятся примеры применения данного подхода к биологическим системам.

Динамический подход в моделировании нелинейных процессов

Известно, что состояния открытых систем, удаленных от термодинамического равновесия, не подчиняются описанию в рамках линейной термодинамики, формализм которой справедлив лишь вблизи равновесных состояний. Это также означает, что для таких систем теорема Пригожина, которая определяет устойчивость рассматриваемых систем, не выполняется [1]. Предметом нелинейной термодинамики необратимых процессов, если следовать В. Журавлеву [2] и И. Бахаревой [3] и др., является установление зависимости между скоростью протекания необратимых процессов и термодинамическими силами в широкой кинетической области существования.

Динамика сложной открытой системы должна, вероятно, включать рассмотрение различных масштабов времени. Поэтому далее мы будем руководствоваться следующим положением. Роль медленных переменных проявляется в процессах обмена с окружающей средой, а быстрые процессы представляют собой внутренние необратимые процессы. Разделение переменных на быстрые и медленные позволяет сократить в математических моделях число дифференциальных уравнений и соответствует переводу подсистемы быстрых переменных в равновесное (или стационарное) состояние.

Динамика линейных систем. Рассмотрим для открытой системы в некоторой локальной области однородное уравнение нелинейного возмущенного движения для внутренней переменной X_i — термодинамической силы в форме

$$\frac{dX_i}{dt} = -\beta X_i + \nu X_e, \quad \alpha > 0, \beta \geq 0; \quad (1)$$

этим самым предполагается наличие релаксации со временем релаксации $\phi = 1/\beta$ к равновесному состоянию при внешней термодинамической силе $X_e = 0$ и наличие стационарного состояния для линейных процессов, при котором $\beta/\nu = X_e/X_i$. Отметим, что выбор потоков и сил при моделировании произволен, но он должен быть совместим с условием положительности производства энтропии. Представим уравнение (1) в виде

$$\frac{dX_i}{dt} = -\phi \frac{\partial G}{\partial X_i}, \quad \text{или} \quad \frac{dX_i}{dt^*} = -\frac{\partial G}{\partial X_i}, \quad t^* = \phi t, \quad (2)$$

где Φ — некоторая константа. Скорость изменения энтропии открытой системы при этом будет равна

$$G = \frac{dS}{dt} = -J_e X_e + J_i X_i + \sigma.$$

Учтем в $G(t)$ величину неформализованных потерь σ , которая также является составной частью производства энтропии и зависит от степени сопряжения внешних и внутренних потоков [4], введением некоторого параметра $\chi \geq 1$: $\sigma = (\chi - 1)J_i X_i$ при $\chi = 1$, $\sigma = 0$; тогда выражение для G будет более определенным:

$$G = \frac{dS}{dt} = -J_e X_e + \chi J_i X_i; \quad \frac{d_i S}{dt} = \chi J_i X_i.$$

Преимущество уравнения (2) перед уравнением (1) очевидно: динамика внутренней термодинамической силы, порождаемая внешним воздействием, определяется градиентом скорости изменения энтропии с точностью до постоянных Φ , χ . Учитывая уравнения Онзагера [4], несложно показать, что

$$G = -L_{ee} X_e^2 - L_{ei} X_e X_i + \chi(L_{ie} X_e X_i + L_{ii} X_i^2),$$

$$\frac{\partial G}{\partial X_i} = (-L_{ei} + \chi L_{ie}) X_e + 2\chi L_{ii} X_i.$$

Равенства $\alpha = 2\chi L_{ii} > 0$, $\beta = -(\chi L_{ie} - L_{ei}) > 0$ являются условиями совместности уравнений (1) и (2). Отсюда следует справедливость уравнения (2) для линейных неравновесных процессов. В данной работе рассматриваются системы, для которых можно ввести термодинамические потоки и силы; таких систем достаточно много [5].

Динамика нелинейных систем. Следуя идее Дьярмати и ее практической реализации, приведенной в [4], представим коэффициент Онзагера для нелинейных процессов в виде полинома термодинамической силы по абсолютной величине:

$$L_{ii}(X_i) = |k_1| - |k_2| X_i + |k_3| X_i^2,$$

здесь $|k_1| = L_{ii}^0$ — коэффициент Онзагера для линейных процессов. Таким образом, уравнение (2) принимает форму нелинейного однородного ДУ

$$\frac{dX_i}{dt} = -2\chi(|k_1| X_i - |k_2| X_i^2 + |k_3| X_i^3) + |k_4| X_e; \quad (3)$$

$$|k_4| = \beta \equiv -(\chi L_{ie} - L_{ei}) > 0;$$

здесь внешняя переменная X_e задана как параметр — этим самым предполагается более медленный характер ее изменения, чем внутренней переменной X_i . Параметрами уравнения являются также все величины $|k_\vartheta|$, где $\vartheta = 1, 2, 3$,

4. Для упрощения записи при последующих выкладках введем некоторые переобозначения: $x \equiv X_i$, $H \equiv X_e$; в результате уравнение (3) приводится к виду

$$\frac{dx}{dt} = -2\chi(|k_1|x - |k_2|x^2 + |k_3|x^3) + |k_4|H. \quad (4)$$

Уравнение (4) можно привести, следуя [4, 6], к каноническому виду:

$$\begin{aligned} \frac{d\eta}{dt} &= -(\eta^3 + a^*\eta + b^*), \quad \eta = x^* - x_0^*, \\ a^* &= -3(x_0^{*2} - 1), \quad b^* = -H^* + 3x_0^* - 2x_0^{*3}, \end{aligned} \quad (5)$$

или

$$\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\partial G^*}{\partial \eta} \quad (6)$$

$$G^* = \frac{dS^*}{dt^*} = \frac{d_e S^*}{dt^*} + \frac{d_i S^*}{dt^*} = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + b^*\eta \Big|_{\leq 0}^{\geq 0};$$

в такой записи G^* — приведенная знакопеременная потенциальная функция, равная относительной (безразмерной) скорости изменения энтропии системы. Согласно (6) градиент скорости изменения энтропии по внутренней термодинамической силе определяет с точностью до знака скорость изменения этой силы. Отметим, что за счет перехода к новой переменной η и новым управляющим параметрам a^* и b^* в правой части канонического уравнения (5) исчезает квадратичный член. Именно такие уравнения в канонической форме изучаются в теории катастроф и нелинейной динамике [7, 8]. Потенциальная функция G^* может принимать отрицательные значения, что соответствует процессам самоорганизации, или положительные значения. В первом случае энтропия системы уменьшается, во втором — увеличивается.

Приведение уравнения (4) к каноническому виду. Умножим левую и правую части уравнения (4) на $(2\chi|k_3|x_c^3)^{-1}$. Введем следующие приведенные (относительные) величины:

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{x}{x_c}; \quad t^* = \frac{t}{t_0}; \quad H^* = \frac{|k_4|H}{2|k_3|\chi x_c^3} = \frac{H}{H_c}; \quad H_c \equiv 2|k_3|\chi x_c^3 / |k_4|; \\ t_0 &= (2\chi|k_3|x_c^2)^{-1}; \end{aligned}$$

здесь масштабные величины с нижним индексом «с» относятся к некоторой особой (критической) точке системы, для времени также введен масштаб времени t_0 . Уравнение (4) может быть представлено в виде:

$$\frac{dx^*}{dt} = -\left(x^{*3} - \frac{|k_2|}{|k_3|x_c} x^{*2} + \frac{|k_1|}{|k_3|x_c^2} x^* - H^* \right); \quad t \equiv t^*. \quad (7)$$

Отметим, что кубическое уравнение $ax^{*3} + gx^{*2} + cx^* + d = 0$ приводится к уравнению $\eta^3 + a^*\eta + b^* = 0$ с особой (критической) точкой, в которой при выполнении условия $a^* = b^* = \eta = 0$

$$\eta = x^* + \frac{g}{3a} = x^* - x_0^*, \quad x_0^* = \frac{|k_2|}{3|k_3|x_c}, \quad x_c^2 = \frac{|k_1|}{3|k_3|}.$$

Уравнение (7) может быть представлено также в виде:

$$\frac{dx^*}{dt} = -(x^{*3} - 3x_0^*x^{*2} + 3x^* - H^*). \quad (8)$$

В критической точке $x^* = x_0^* = H^* = 1$. Несложно доказать, что уравнение (8) переходит в уравнение (5), в котором новая переменная η и управляющие параметры равны:

$$\eta = x^* - x_0^*, \quad a^* = -3(x_0^{*2} - 1), \quad b^* = -H^* + 3x_0^* - 2x_0^{*3}. \quad (9)$$

Переменная η , характеризующая отклонение изучаемой характеристики от среднего значения $x_0^* = (x_+^* + x_-^*)/2$, является параметром порядка (по Г. Хакену [8]). Это среднее значение находится из уравнения равновесия $\eta(\eta^2 + a^*) = 0$, из которого следует $x_+^* = x_0^* + \sqrt{-a^*}$, $x_-^* = x_0^* - \sqrt{-a^*}$.

Соответствие между нелинейной моделью и II законом термодинамики

Уравнение (4) должно быть совместимо с условием положительности производства энтропии

$$\sigma^i = \frac{d_i S}{dt} = \chi J(x)x = \chi |k_1| x^2 \left(1 - \frac{2|k_2|}{3|k_1|} x \right) + \frac{\chi |k_3|}{2} x^4 \geq 0, \quad x = X_i,$$

Последнее выражение может быть представлено в виде:

$$G^{*i} = \frac{1}{4} x^{*2} (x^{*2} - 4x_0^*x^* + 6) \geq 0. \quad (10)$$

Решение неравенства вида $ax^2 + bx + c \geq 0$ зависит от знака параметров a и дискриминанта $D = b^2 - 4ac$; $a = 1$, $b = -4x_0^*$, $c = 6$. При $a > 0$ следует лишь рассматривать знаки D . При $D > 0$ неравенство можно записать в виде $ax^2 + bx + c = a(x - x_+)(x - x_-) \geq 0$, где $x_{+,-} = (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})/2a$ — два действительных корня уравнения $ax^2 + bx + c = 0$. Неравенство имеет следующие решения: $x > x_+$ и $x < x_-$. Если $D \leq 0$, тогда уравнение $ax^2 + bx + c = 0$ не имеет действительных корней или один корень ($D = 0$),

поэтому (10) выполнимо для любого x^* . Необходимо рассмотреть случай $D \leq 0$, $D = 16\left(x_0^{*2} - \frac{3}{2}\right)$, поэтому условию $D \leq 0$ удовлетворяет неравенство

$$x_0^{*2} \leq \frac{3}{2}, \text{ или } |k_2|^2 < \frac{9}{2}|k_1||k_3|. \quad (11)$$

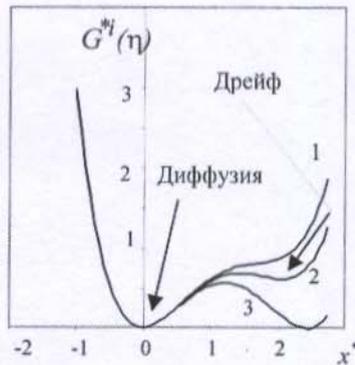


Рис. 1. Производство энтропии в канонической форме. Глобальный минимум соответствует равновесному состоянию, так как для него термодинамическая сила равна нулю: $x = X_i = 0$, локальный — стационарному состоянию;

$$x^* = \eta + x_0^*; \quad 1 - x_0^2 = 1,143095, \quad 2 - 1,172791, \quad 3 - 1,225527$$

Сделав замену переменной в (10) $x^* = \eta + x_0^*$ [6], получаем следующее каноническое выражение для производства энтропии (рис. 1):

$$G^* = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + H_s^*\eta + H_0^* \geq 0, \quad \eta = x^* - x_0^*, \quad (12)$$

здесь

$$a^* = -3(x_0^{*2} - 1), \quad H_s^* = 3x_0^* - 2x_0^{*3}, \quad H_0^* = \frac{3}{4}x_0^{*2}(2 - x_0^{*2}).$$

Выражение (12) не содержит внешнее поле $H^* = 0$. Положительности производства энтропии в уравнении (12) отвечает условие: $x_0^{*2} \leq 3/2$, $a^* \geq -3/2$. Сама же потенциальная функция G^* может иметь любой знак, так как включает еще линейное по η слагаемое, связанное с обратимыми потоками энтропии.

Устойчивость нелинейных термодинамических систем

Докажем следующую теорему для нелинейных систем, которая впервые сформулирована одним из авторов этой статьи в [4].

Теорема. Временная эволюция в нелинейной термодинамической системе при заданных постоянных граничных условиях происходит так, что производство энтропии G^{*i} стремится убывать

$$\frac{dG^{*i}}{dt} \leq 0 \quad (13)$$

и достигает минимального (положительного) значения в ближайшем стационарном состоянии, локальная или глобальная устойчивость которого определяется теоремой Тома. Движение к локальному/глобальному минимуму осуществляется посредством дрейфа/диффузии.

Доказательство. 1. Производство энтропии (12) с ростом катастрофы η^4 является при $x_0^{*2} \leq 3/2$ (см. рис. 1) знакоположительной функцией $G^{*i} \geq 0$ для различных значениях переменной η . После дифференцирования G^{*i} по времени получаем

$$\frac{dG^{*i}}{dt} = (\eta^3 + a^* \eta + H_s^*) \frac{d\eta}{dt}. \quad (14)$$

Так как из (5) следует при $H^* = 0$ уравнение

$$\frac{d\eta}{dt} = -(\eta^3 + a^* \eta + H_s^*),$$

то в результате получаем из (14), что \dot{G}^{*i} является функцией знакоотрицательной:

$$\frac{dG^{*i}}{dt} = -(\eta^3 + a^* \eta + H_s^*)^2.$$

Отсюда следует, что функции

$$G^{*i} \geq 0, \quad \dot{G}^{*i} \leq 0 \quad (15)$$

являются функциями Ляпунова [9]. Этим доказывается часть теоремы, связанная с уменьшением производства энтропии.

2. При наличии флуктуаций нелинейная система описывается вероятностной функцией распределения g , которая связана с потенциальной функцией системы G^{*i} посредством уравнения Фоккера — Планка [7]

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \nabla(g \nabla G^{*i}) + \nabla^2(Dg), \quad (16)$$

здесь D — коэффициент диффузии. Правая часть уравнения состоит из двух членов — «дрейфа» и «диффузии». Дрейф $\nabla(g \nabla G^{*i})$ заставляет функцию распределения двигаться по направлению к ближайшему локальному минимуму. Роль диффузии $\nabla^2(Dg)$ двойка: она описывает (1) размах функции распределения, которая концентрируется вокруг локального минимума, и (2)

вероятность, с которой флуктуация может перевести систему из метастабильного (локального) минимума в глобальный минимум (см. рис. 1). Так в рассмотрение вводится устойчивость и доказывается вторая часть теоремы. Для описываемой катастрофы левый экстремум соответствует равновесному состоянию, правый — стационарному. Таким образом теорема доказана для частного случая катастрофы сборки. С увеличением показателя роста катастрофы x^5 , x^6 число стационарных состояний увеличивается. Если флуктуаций нет (или они ничтожно малы), то диффузия от локального к глобальному минимуму производства энтропии отсутствует. У таких систем производство энтропии может принимать достаточно высокое значение.

3. Далее введены для исследуемых функций такие основные понятия, как росток катастрофы, возмущение, устойчивость, наследственность и особенность. Они являются необходимыми для формулировки теоремы Тома и доказательства устойчивости.

Катастрофа сборки в описании неравновесных нелинейных процессов в открытых системах. Элементарная теория катастроф [7, 10] в качестве одного из приближений, при которых она получена, содержит k управляющих параметров катастрофы с ростком x^{k+2} , независимых от времени t . В данной работе рассматриваются динамические особенности одной элементарной катастрофы — катастрофы сборки. Катастрофа сборки, где x — переменная, описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial F(x, a, b)}{\partial x}, \quad F(x, a, b) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx,$$

здесь $F(x, a, b)$ — семейство типичных потенциальных функций [7]. Такое представление тождественно базовому уравнению (5). В силу важности такого представления укажем его основные математические и геометрические свойства, которые и определяют теорему Тома.

Росток катастрофы. Возмущение. В потенциале F величина x^4 является ростком катастрофы, а величина $\varepsilon f = bx + ax^2/2$ — произвольным возмущением.

Лист состояний и лист управляющих параметров катастрофы сборки. Графическое изображение катастрофы. Рис. 2 дает наглядное изображение катастрофы сборки, которая состоит из двух листов: состояний и управляющих параметров [7, 10]. Лист состояний описывается кубическим уравнением $x^3 + ax + b = 0$, т. е. соответствует равновесным решениям, число которых в области действительных чисел будет определяться управляющими параметрами a, b .

Как определяется устойчивость состояний? Локальная или глобальная устойчивость текущего состояния системы определяется видом потенциальной функции F . На рис. 3 представлены частные случаи исследования устойчивости текущих состояний. Для локально устойчивых состояний второй минимум выражен слабо. Это соответствует метастабильному состоянию.

Вырожденные точки. Согласно теореме Тома [7] для катастрофы сборки вводятся следующие особые (в математическом отношении) точки:

1. $\frac{dF}{dx} = 0, x^3 + ax + b = 0$ — вырожденные точки (соответствуют экстремуму потенциальной функции F).
2. $\frac{d^2 F}{dx^2} = 0, 3x^2 + a = 0$ — дважды вырожденные точки, расположенные по линиям LC, BC (решения, соответствующие двум экстремумам потенциальной функции становятся равными).
3. $\frac{d^3 F}{dx^3} = 0, 6x = 0$ — трижды вырожденная точка C (решения, соответствующие трем экстремумам потенциальной функции, становятся равными и равны 0).

Сепаратриса. Решение двух совместных алгебраических уравнений

$$x^3 + ax + b = 0, 3x^2 + a = 0$$

дает уравнение сепаратрисы $\{LC, BC\}: (a/3)^3 + (b/2)^2 = 0$. Сепаратриса является предельной для метастабильных состояний.

Особенности. Произвольное возмущение может изменить местонахождение и ориентацию сепаратрисы, однако оно не может изменить ее вида. Другими словами, особенность в отображении проектирования устойчива относительно возмущений. Особенности присутствуют лишь в отображении проектирования вниз на нижнюю плоскость.

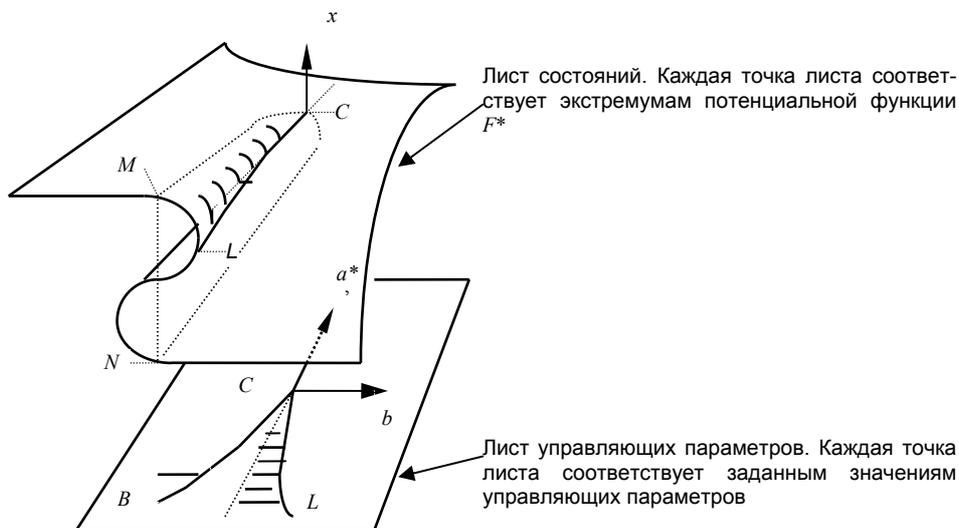


Рис. 2. Катастрофа сборки в анализе локальной и глобальной устойчивости систем; C — критическая точка. Заштрихована область метастабильной первой фазы $x > 0$

Наследственное свойство. Возмущение в точке, где имеет место наследственное свойство (устойчивая точка), качественно на это свойство не

влияет. Возмущения же в неустойчивой точке будут приводить к значительным изменениям.

Время релаксации. Согласно теории неравновесных фазовых переходов [4] при варьировании левой и правой частей уравнения (5) получаем релаксационное уравнение

$$\frac{d\delta x}{dt} = -\frac{\delta x}{\tau},$$

где

$$\tau = \frac{1}{3x^2 + a}.$$

Последнее означает, что при описании фазовых переходов можно ввести *время релаксации* τ ; здесь отклонение от равновесного значения $\delta x = x - x_0$, где x_0 находится при $b = 0$ из решения кубического уравнения $x(x^2 + a) = 0$: $x_0 = \pm\sqrt{-a}$. При $x \rightarrow x_0$ $\tau \rightarrow \tau_0 = 1/2x_0^2$.

Фазовые переходы. Каждая точка равновесия A или B характеризуется своей структурой. Переход из состояния A в состояние B (или наоборот) является фазовым переходом первого рода. При фазовых переходах I рода x меняется скачком и имеет место гистерезис. Переход через точку C по линии равновесия является аналогом фазового перехода II рода. При фазовых переходах II рода x меняется непрерывным образом и гистерезис отсутствует.

Время релаксации τ_0 стремится к бесконечности при $x_0 \rightarrow 0$ ($a \rightarrow 0$) и обеспечивает согласно теории неравновесных фазовых переходов существование макроскопических состояний, отвечающих неполному равновесию описываемой системы при заданных неравновесных значениях x .

Влияние внешнего поля. Для бифуркационного уравнения, описывающего катастрофу сборки, управляющий параметр в правой части уравнения есть $b = -f_e + f_i$, где f_e — «силовая» стационарная характеристика внешнего поля, f_i — «силовая» характеристика стационарного внутреннего самосогласованного поля.

Восприимчивость. Восприимчивость $\chi(x, a) = \partial x / \partial f_e = (3x^2 + a)^{-1}$ для равновесного состояния системы, описываемого уравнением $x^3 + ax + b = 0$, или $f_e = f_i + ax + x^3$, характеризует изменение параметра порядка при изменении внешнего поля f_e .

Деформация потенциальной функции. Под деформацией потенциальной функции будем понимать последовательные изменения вида потенциальной функции: переход от кривой 1 к кривой 2 (рис. 3б) и наоборот. Эта деформация осуществляется за счет включения внешнего поля, т. е. за счет изменения управляющего параметра b при $a < 0$.

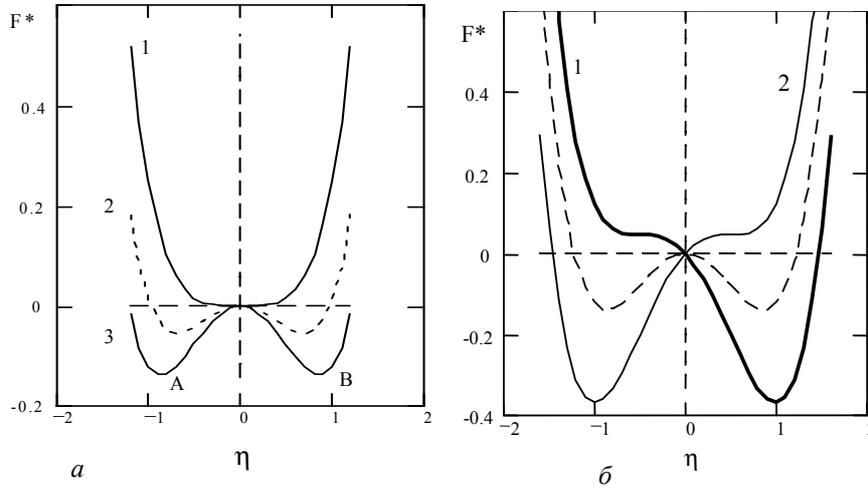


Рис. 3. Вид потенциальной функции:

а — на линии равновесия NC : 1 — при $a > 0$ (выше критической точки система всегда устойчива); 2, 3 — ниже критической точки (двухфазное состояние с одинаковой устойчивостью обеих фаз);

б — на сепаратрисе: 1 — глобальная устойчивость первой фазы; 2 — глобальная устойчивость второй фазы

Термодинамика нелинейных процессов.

Анализ скорости изменения энтропии и свободной энергии

Приведенная знакопеременная потенциальная функция, равная относительной (безразмерной) скорости изменения энтропии системы входит в структуру уравнения

$$\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\partial G^*}{\partial \eta}, G^* = \frac{dS^*}{dt} = G^{*e} + G^{*i} = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + b^*\eta \Big|_{\leq 0}^{\geq 0}. \quad (17)$$

Здесь производство энтропии $G^{*i} \geq 0$ и обратимые потоки энтропии G^{*e} равны соответственно

$$G^{*i} = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + H_s^*\eta + H_0^* \geq 0, \quad \eta = x^* - x_o^*, \quad (18)$$

$$G^{*e} = -(H_0^* + H^*\eta) \Big|_{\leq 0}^{\geq 0},$$

где

$$b^* = -H^* + H_s^*, \quad a^* = -3(x_0^{*2} - 1),$$

$$H_s^* = 3x_0^* - 2x_0^{*3}, \quad H_0^* = \frac{3}{4}x_0^{*2}(2 - x_0^{*2}).$$

Условие положительности производства энтропии отражается в потенциальной функции G^* условием $x_0^{*2} \leq 3/2$ для различных значений x^* . Сама же

потенциальная функция G^* может иметь любой знак, так как включает еще слагаемое G^{*e} , связанное с обратимыми потоками энтропии. Проведем анализ скорости изменения энтропии $G^* = G^{*e} + G^{*i}$, придерживаясь следующей последовательности.

Случай $a^* < 0$. Рассмотрим влияние на устойчивость двух условий, соответствующих двум принципиально различным состояниям термодинамической системы: $a^* < 0$, $a^* > 0$. Динамика такой неравновесной системы является нелинейной (рис. 3), а количество устойчивых стационарных состояний при заданных параметрах два — x_+^* , x_-^* .

Таким образом, переменная $\eta(t) = x^*(t) - x_0^*$ является параметром порядка, характеризующим отклонение переменной (например, внутренней термодинамической силы) от некоторого среднего значения, именно такой смысл придавал Г. Хакен параметру порядка [8]. В общем же случае множества стационарных состояний наивысший показатель степени при x^* в уравнении типа (5) будет задавать количество этих стационарных состояний, часть из которых будет принадлежать локально или глобально устойчивым состояниям. Как доказано выше, положительность производства энтропии дается условием $x^* > 0$. Медленным изменением внешней термодинамической силы $H^* \equiv X_e/X_c$ такую систему можно перевести из одного стационарного состояния в другое. В отличие от симметричного потенциала (рис. 4а, кривая 1) левый минимум потенциала, представленного на рис. 4б (кривая 1), следуя [7], будем называть *глобальным*, правый *локальным*, они соответствуют стационарным состояниям и наблюдаются в области с отрицательными значениями скорости изменения энтропии, которые, принято считать, описывают процессы самоорганизации. Если в потенциальной функции выделяются локальный и глобальный минимумы, то говорят обычно о структурной устойчивости (локальной или глобальной), когда учет малого и на первый взгляд не существенного параметра может изменить результаты анализа устойчивости.

Состояние системы относительно η (внутренней термодинамической силы) и параметра b^* (внешней силы) в глобальном минимуме будет устойчивым, в локальном — метастабильным, оба этих состояния, тем не менее, неустойчивы по Ляпунову.

Рассмотрим теперь, следуя [4], масштабы времени и связанные с ними стационарные состояния. Взяв вариационную производную $\delta\eta = \eta - \eta_0$ от левой и правой частей уравнения (5), получаем релаксационное уравнение (10), где время релаксации параметра порядка $\tau_0 = (3\eta^2 + a^*)^{-1}$. Времена релаксации в окрестности каждого стационарного состояния (рис. 4б) в общем случае не совпадают: $\tau_{01} \neq \tau_{02}$. Для симметричных состояний в приближении Ландау $\tau_{01} = \tau_{02} = -1/2a^*$, так как $\eta^2 = -a^*$ [5]. Таким образом, для квазистатических (медленных) процессов ($J_e = J_i = X_e = X_i = 0$), изучаемых в равновесной термодинамике, можно ввести длительность процессов, которая должна быть $\Delta t \gg \tau_0$.

При $a^* > 0$, $b^* = 0$ скорость изменения энтропии является определенно-положительной функцией относительно координаты η (термодинамической силы):

$$G^*(\eta) = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}|a^*|\eta^2 > 0.$$

Случай $a^* > 0$. Критическая точка является предельной для бистабильной системы — выше критической точки исчезают оба стационарных режима. Функция однозначна, непрерывна, производная ее по времени является знакопостоянной функцией противоположного знака с $G^*(\eta)$:

$$\frac{dG^*}{dt} = -(\eta^3 + |a^*|\eta)^2 \leq 0.$$

Знакоопределенная функция G^* имеет при $\eta = 0$ экстремум — минимум (рис. 4а, кривая 2), т. е. G^* является функцией Ляпунова. Невозмущенное движение $\eta = 0$, соответствующее постоянной энтропии, асимптотически устойчиво по Ляпунову, так как \dot{G}^* — знакоопределенная функция и обращается в нуль в начале координат, когда $\eta = 0$.

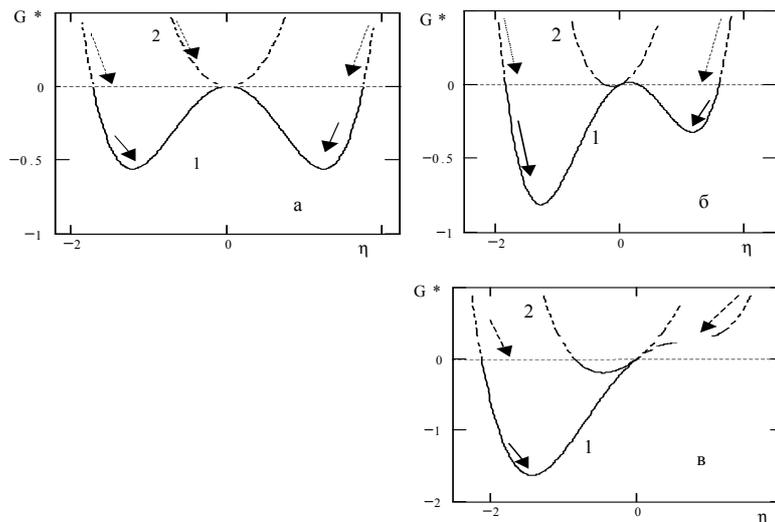


Рис. 4. Эволюция открытой термодинамической системы к ближайшему локальному минимуму скорости изменения энтропии G^* : а — $b^* = 0$; б — $0,2$; в — $0,6$; кривая 1 — $a^* = -1,5$; кривая 2 — $a^* = 1,5$. Штриховые линии соответствуют области устойчивых по Ляпунову процессов, непрерывные линии — области самоорганизации (структурная устойчивость)

Скорость изменения свободной энергии F может быть представлена в приведенном (безразмерном) в виде [4]:

$$\frac{d\Lambda^{*F}}{dt} = -T^* G^*, \quad \Lambda^{*F} = F^* - 1 \geq 0, \quad F^* = F/F_0; \quad \frac{d\Lambda^{*F}}{dt} = -T^* G^*,$$

тогда вторая производная с учетом (6) равна:

$$\frac{d^2\Lambda^{*F}}{dt^2} = -T \frac{\partial G^*}{\partial \eta} \frac{d\eta}{dt} = T \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2, \quad (T^* > 0).$$

функция G^* и ее знак будут определять знак функции $\dot{\Lambda}^{*F}$: $\dot{\Lambda}^{*F} < 0, \dot{\Lambda}^{*F} > 0$. Это и означает, что при $a^* > 0$ для устойчивых по Ляпунову нелинейных процессов приращение свободной энергии является знакоположительной функцией. При $b^* \neq 0$ имеются области как устойчивых, так и неустойчивых по Ляпунову процессов.

Функция распределения. Рассмотрим ситуации, которые возникают в физических системах, когда в них имеются флуктуации. В этом случае нелинейная термодинамическая система описывается вероятностной функцией распределения g , которая связана с потенциальной функцией системы G^* посредством уравнения Фоккера — Планка с потенциальной функцией G .

Ввиду важности укажем, что правая часть уравнения состоит из двух членов — «дрейфа» и «диффузии». Дрейф $\nabla(g\nabla G)$ заставляет функцию распределения двигаться по направлению к ближайшему локальному минимуму. Роль диффузии $\nabla^2(Dg)$ двояка: она описывает (1) размах функции распределения, которая концентрируется вокруг локального минимума, и (2) вероятность, с которой флуктуация может перевести систему из метастабильного (локального) минимума в глобальный минимум.

Такой подход показывает, что анализ решений (5), (6) для нестационарных условий подразумевает использование термодинамических уравнений для свободной энергии, определенной для неравновесных условий. Совместное рассмотрение указанной системы уравнений в обоих рассмотренных случаях (по потокам и силам) позволяет сделать следующие выводы. Временная эволюция в нелинейной системе при заданных постоянных граничных условиях ($H = \text{const}$) происходит так, что скорость изменения энтропии $G^* < 0$ (при $a^* < 0, b^* \neq 0$) достигает одного из ближайших минимумов — состояние определяется устойчивым (стабильным) или метастабильным минимумом до тех пор, пока он существует. При $a^* > 0, b^* = 0$ начало координат является асимптотически устойчивым по Ляпунову. При наличии внутренних флуктуаций система из метастабильного минимума движется к глобальному.

Переход от релаксационных уравнений

локально-неравновесных систем к уравнениям второго порядка

Для локально-неравновесных систем, в которых необходимо учитывать релаксацию скорости изменения энтропии, следует решать совместно систему двух динамических уравнений для параметра порядка $\eta(t)$ $\eta = x^* - x_0^*$ и приведенной скорости изменения энтропии G^* . Последняя является знакопеременной потенциальной функцией, и для нее справедливо градиентное уравнение

$$\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\partial G^*}{\partial \eta}, \quad G^* + \tau_r \frac{dG^*}{dt} = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + b^*\eta, \quad (19), (20)$$

здесь $\tau_r \equiv \tau_r/t_0$ — время релаксации скорости изменения энтропии, или время релаксации потока одного из самых длительных неравновесных процессов. Параметр порядка η связан с отклонением термодинамического потока $x = J_i$ (или силы X_i) от среднего значения x_0 в приведенном виде $\eta = x/x_c - x_0/x_c$, здесь $x_c = J_{ic}$ — некоторый масштаб потока (или силы X_{ic}). В системе уравнений (19)–(20) уже два параметра порядка, η и G^* .

Дифференцировав (20) по η и подставив полученное выражение в (19), получаем дифференциальное уравнение второго порядка для локально-неравновесных систем

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \tau_r \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = f(\eta, t), \quad f(\eta, t) = -\frac{\partial G^*}{\partial \eta} = -(\eta^3 + a^*\eta + b^*), \quad (21)$$

где f — обобщенная сила двухъямного потенциала G^* [4]. Член с τ_r можно не учитывать, когда время релаксации скорости изменения энтропии существенно меньше времени действия внешних сил $\tau_r/\Delta t \ll 1$. Термодинамические уравнения (19)–(21) характеризуют локально-неравновесные процессы. Следует обратить внимание на то, что в нелинейном уравнении (21) сила f , параметр порядка η , скорость его изменения $\dot{\eta}$ и член $\tau_r \ddot{\eta}$ определены в один и тот же момент времени t .

Можно рассмотреть частный случай, когда внешняя сила H^* изменяется по гармоническому закону. Это означает, что управляющие параметры в (21) можно представить в виде

$$b^* = -H^* + H_s^* = -H_0^* \cos \omega t, \quad H_s^* = 3x_0^* - 2x_0^{*3}, \quad a^* = -3(x_0^{*2} - 1); \quad (22)$$

здесь ω — циклическая частота изменения H^* ; при $t=0$ $H_0^* = H^* - H_s^*$. Наличие в (21) времени релаксации и переход к ДУ второго порядка является необходимым, но недостаточным условием возникновения хаоса.

Термодинамические системы с последствием. Возникновение хаоса

Если следовать [4, 11–13], то в реальных сложных системах нужно учитывать также последствие (*aftereffect*). Процитируем вводные суждения Дж. Хейла [14]: «Во многих приложениях предполагается, что... будущее состояние системы не зависит от прошлых состояний. ...однако при более тщательном изучении часто становится очевидным, что... более реалистичная модель должна включать некоторые из предшествующих состояний системы».

В узком смысле, например, упругое последствие — упругая обратимая деформация, происходящая через некоторое время после изменения нагрузки. Последствие можно найти во многих задачах механики, механики сплошных сред, биофизики и т. д. Сформулируем одну из самых простых постановок задач по моделированию с учетом последствия. В термодинамическом смысле если внешнее воздействие представлено в момент времени

$t - \tau$, то обобщенная сила $f = -\partial G^* / \partial \eta$ задана при последствии в виде $f(\eta, t - \tau) = \overset{\circ}{\mathcal{F}}f(\eta, t)$. При этом в каждом конкретном смысле причина последствия — в структуре и различной неоднородности сплошной среды. При этом диссипативный $\overset{\circ}{\eta}(t)$ и инерционный $\tau_r \overset{\circ}{\eta}(t)$ члены определены в момент времени t . В результате приходим к уравнению для параметра порядка η с запаздыванием:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \tau_r \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = \overset{\circ}{\mathcal{F}}f(\eta, t). \quad (23)$$

В результате имеем:

$$\overset{\circ}{\mathcal{F}}f(\eta, t) = f(\eta, t) - \tau \left(\frac{\partial f(\eta, t)}{\partial \eta} \frac{d\eta}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right), \quad (24)$$

где

$$f(\eta, t) = -\frac{\partial G^*}{\partial \eta} = -(\eta^3 + a^* \eta) + \sigma_0^* \cos \omega t.$$

В системе уравнений (19), (20) и (24) уже три параметра порядка, η , G^* и $f(\eta, t - \tau)$. В результате вместо уравнения (21) получаем для локально-неравновесных систем с запаздыванием каноническое однородное уравнение второго порядка во времени [4], содержащее время ретардации (запаздывания), в котором:

$$\tau_r \overset{\circ}{\eta} + \Gamma(\eta, t) \overset{\circ}{\eta} + \eta^3 + a^* \eta = h_0^* \cos \omega t. \quad (25)$$

Здесь декремент затухания и амплитуда внешней силы равны соответственно

$$\Gamma(\eta, t) = 1 - \tau(3\eta^2 + a^*) > 0, \quad h_0^* = h_0^* (1 + \tau \omega \operatorname{tg}(\omega t));$$

где $\tau = \tau / t_0$ — приведенное время ретардации (запаздывания); $\tau_r = \tau_r / t_0$ — приведенное время релаксации скорости изменения энтропии (определяется наибольшим временем релаксации одного из термодинамических потоков).

Базовое уравнение соответствует различной нелинейности — катастрофе складки, сборки, ласточкину хвосту и т. д. Для иллюстрации выбрано базовое уравнение для катастрофы сборки, которое описывает фазовые переходы I и II рода. Остальные уравнения описаны нами в работе [15].

Численные решения нелинейного уравнения для η (25), которое представлялось системой трех нелинейных дифференциальных уравнений, показывают наличие в широкой области значений управляющих параметров не только регулярных, но и хаотических решений (рис. 5). Как видно из рисунков, при некоторых значениях параметров в уравнении имеет место как гомо- так и гетерофазный хаос, реализующийся по типу странного аттрактора.

В такой нелинейной термодинамической системе параметр порядка η «мечется» между двумя симметричными стационарными состояниями (фазами)

$$\eta_+ = \sqrt{-a^*}, \quad \eta_- = -\sqrt{-a^*}, \quad \text{оба из которых являются неустойчивыми (рис. 5а).}$$

Скорость изменения энтропии как функционал. Подставив хаотические решения в выражение для скорости изменения энтропии G^* , получаем для этой функции (второго параметра порядка) хаотические значения (при $a^* < 0$, рис. 5а). Третий параметр порядка $f(t - \tau)$, определяемый выражением (24), также дает хаотические решения возле его нулевого значения. Хаотическую динамику решений уравнения (25) можно представить как хаотические колебания в одной из потенциальных ям с перебросом время от времени в другую яму. Можно определить среднее значение G^* .

Параметр порядка η , зависящий от времени последнего действия τ , при движении по странному аттрактору характеризует отклонение истории одного движения от истории другого, т. е. метрику [13].

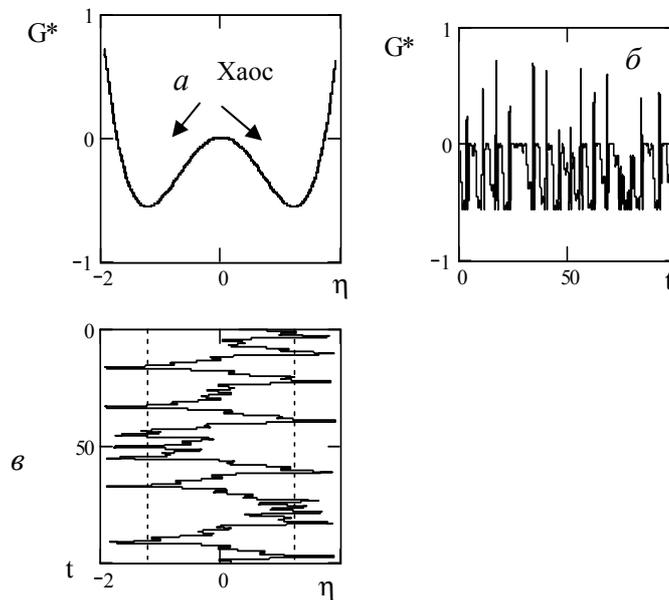


Рис. 5. Хаотическая динамика скорости изменения энтропии G^* (а, б) и параметра порядка η (в). Положительные значения G^* соответствуют устойчивым состояниям по Ляпунову, отрицательные — структурной устойчивости

Производство энтропии как функционал. Достаточно интересным при наличии хаоса является поведение производства энтропии (рис. 6). Расчет производился по функционалу

$$G_k^{*i} = \frac{1}{4} \eta_k^4 + \frac{1}{2} a^* \eta_k^2 + H_s^* \eta_k + H_0^*,$$

в который подставлялись значения решений уравнения (25) и параметры, определенные в (12). На рис. 6в стационарные области обозначены круговыми областями. Центры этих областей характеризуют стационарные состояния.

При таком моделировании критерий эволюции системы — производство энтропии — начинает зависеть от флуктуаций, и они отражают присущие системе нелинейные свойства. Проблема устойчивости в условиях хаоса сводит-

ся к перенесению свойств функций Ляпунова $G^{*i} \geq 0$, $\dot{G}^{*i} \leq 0$ с асимптотической устойчивостью на подходящие свойства функционала Ляпунова G_k^{*i} .

При всех значениях η_k производство энтропии остается положительной величиной. Левый минимум на рис. 6б соответствует равновесному состоянию, правый — стационарному. При численных расчетах обнаружено достаточно большое время пребывания в правой нише, т. е. в состоянии с большим производством энтропии. Такие состояния часто встречаются в физических системах. Переменная во времени функция $G^{*i}(t, \eta(t))$ изменяется вдоль возмущенного движения $\eta(t)$ немонотонно, неограниченно не возрастает, находясь вблизи двух аттракторов, но и не убывает.

Из сравнения рис. 5а, б и 6а, б видны отличия в поведении скорости изменения энтропии и производства энтропии.

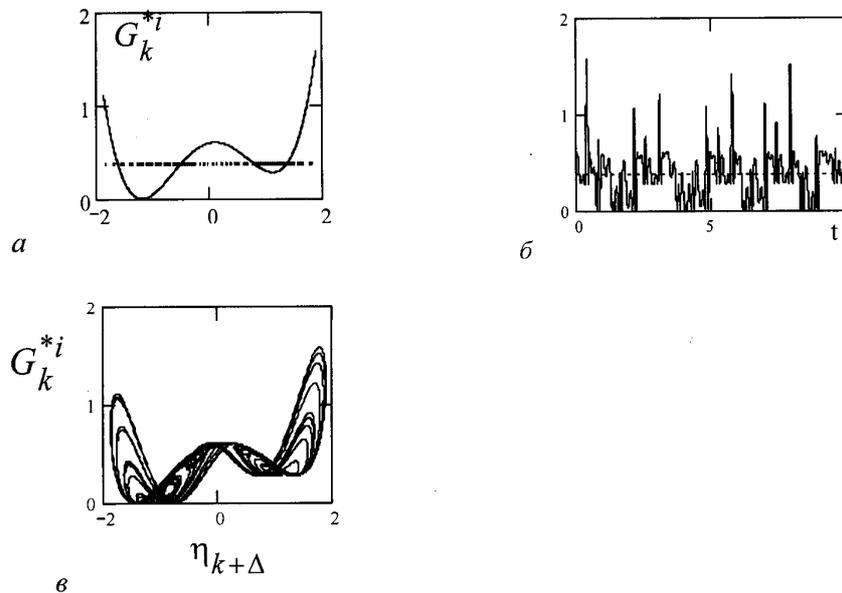


Рис. 6. Поведение приведенного функционала производства (а, б) энтропии G_k^{*i} при x_0^* в условиях воздействия периодической внешней силой $\omega = 2,35$, $b = 1,9$, $\tau_r = 1,1$, $\tau = 0,216$, $x_0^* = 1,204$. Начальные условия для трех переменных: 0,1; 0,02; 0,1; линией указано среднее значение функционала во времени 0,381; $\Delta t = 0,01$ — шаг разбиения; продолжительность всей истории движения $h = t(n) = 100$. Вид функционала от параметра порядка, определенного в предшествующий момент времени с задержкой $\Delta = 20$ расчетных точек (в)

Описываемый хаос в термодинамической системе по первому приближению является детерминированным, так как решаемое численными методами уравнение не содержит источников шума; он обусловлен нелинейными особенностями уравнения, проявляемыми при периодическом воздействии на систему. Для таких

нелинейных «наследственных» систем [13], которые принято называть системами с последствием, динамические законы однозначно определяют эволюцию во времени состояния системы при известной предыстории.

Производство энтропии при деформации саркомеров

В статье [16] была рассмотрена динамика нелинейного сокращения саркомера. Авторами было выдвинуто предположение, что для нелинейных процессов одномерной деформации по оси растяжения коэффициент упругости, следуя [17], представляется в виде полинома:

$$\mu(\varepsilon) = \mu_0(1 - k\varepsilon + \chi\varepsilon^2), \quad (26)$$

где ε — модуль относительной одномерной деформации вдоль оси растяжения, μ_0 — коэффициент упругости для линейных систем, а k и χ — некоторые коэффициенты, характеризующие зависимость модуля упругости в направлении оси растяжения от величины деформации.

Подставив (26) в динамическое уравнение продольного сокращения относительно оси растяжения

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d\varepsilon}{dt} = -\mu\varepsilon + \sigma_e,$$

получаем термодинамическое нелинейное уравнение, описывающее сокращения саркомера, в виде

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\varphi(\mu_0\chi\varepsilon^3 - \mu_0k\varepsilon^2 + \mu_0\varepsilon - \sigma_e), \quad (27)$$

где φ — некоторая размерная константа, σ_e — внешние напряжения.

Также была введена в модель потенциальная функция G — свободная энергия, связанная с упругой нелинейной деформацией выражением вида

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\varphi \frac{\partial G}{\partial \varepsilon}, \quad G = \frac{\mu_0\chi\varepsilon^4}{4} - \frac{\mu_0k\varepsilon^3}{3} + \frac{1}{2}\mu_0\varepsilon^2 - \sigma_e\varepsilon. \quad (28)$$

Уравнение (27) должно быть совместимо с условием положительности производства энтропии

$$\frac{d_i S}{dt} = J(\varepsilon)\varepsilon = \mu'_0\varepsilon^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}k\varepsilon + \frac{1}{4}\chi\varepsilon^2 \right) \geq 0,$$

где константа $\mu'_0 = \mu_0/T_0$ имеет размерность Дж/К, а параметр T_0 — температура, при которой происходит сокращение саркомера. Выражение для производства энтропии $d_i S/dt$ может быть представлено выражением, аналогичным (10):

$$G^{*i} = \frac{1}{4}\varepsilon^{*2}(\varepsilon^{*2} - 4\varepsilon_0^*\varepsilon^* + 6) \geq 0, \quad (29)$$

где $\varepsilon^* = \varepsilon/\varepsilon_c$, $\varepsilon_c^2 = 1/3\chi$, $\varepsilon_0^* = \varepsilon_0/\varepsilon_c = k/3\chi\varepsilon_c$.

Далее, следуя выкладкам для выражения (10), необходимо рассмотреть решения неравенства вида $ax^2 + bx + c \geq 0$, входящего в (29), в зависимости от знака параметров a и дискриминанта $D = b^2 - 4ac$; $a = 1$, $b = -4\varepsilon_0^*$, $c = 6$. Для выполнения выражения (29) необходимо, чтобы параметры, входящие в него, удовлетворяли следующим неравенствам:

$$\varepsilon_0^{*2} \leq \frac{3}{2}, \text{ или } k^2 \leq \frac{9}{2}\chi.$$

Сделав замену переменной в (29) $\varepsilon^* = \eta + \varepsilon_0^*$, получаем уравнение (12) для производства энтропии с параметром порядка η и со следующими обозначениями: $x_0^* \equiv \varepsilon_0^*$, $\sigma_s^* \equiv H_s^*$, $G_0^* \equiv H_0^*$. Выражение (12) не содержит внешнего поля $\sigma_e^* \equiv \sigma^* = 0$. Положительности производства энтропии отвечает условие: $a^* \geq -3/2$ (рис. 1). Отсюда следует, что функции $G^{*i} \geq 0$, $\dot{G}^{*i} \leq 0$ являются функциями Ляпунова.

Этот вывод показывает применимость сформулированной теоремы для биологических объектов саркомеров в ее первой части, так как доказательство второй и третьей частей не составляет труда.

Приведенная знакпеременная потенциальная функция, равная относительной (безразмерной) скорости изменения энтропии системы, также примет вид:

$$G^* = \frac{dS^*}{dt^*} = G^{*e} + G^{*i} = \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{1}{2}a^*\eta^2 + b^*\eta \Big|_{\leq 0}^{\geq 0}.$$

Здесь обратимые потоки энтропии G^{*e} также могут принимать разные знаки:

$$G^{*e} = -(G_0^* + \sigma^*\eta) \Big|_{\leq 0}^{\geq 0}.$$

Поэтому потенциальная функция G^* может иметь любой знак.

Используя вышеприведенный переход от релаксационных уравнений к уравнениям второго порядка и учитывая эффект последствия, получаем однородное каноническое уравнение второго порядка для величины деформации η в первом приближении (25), где $h_0^* \equiv \sigma_0^*$, $h_0^* \equiv \sigma_0^*$.

Рассмотрим поведение производства энтропии при наличии хаоса (рис. 6). Расчет производился по функционалу

$$G_k^{*i} = \frac{1}{4}\eta_k^4 + \frac{1}{2}a^*\eta_k^2 + \sigma_s^*\eta_k + G_0^*,$$

в который подставлялись значения решений уравнения (25) (k — индекс шага расчета); здесь

$$a^* = -3(\varepsilon_0^{*2} - 1), \sigma_s^* = 3\varepsilon_0^* - 2\varepsilon_0^{*3}, G_0^* = \frac{3}{4}\varepsilon_0^{*2}(2 - \varepsilon_0^{*2}).$$

На рис. 6в представлено возмущенное состояние саркомера с временной задержкой $\Delta = 20$. В отличие от невозмущенного состояния (рис. 6а), данный

график характеризуется замкнутыми областями, отвечающими за определенные невозмущенные стационарные состояния. Центры этих областей являются глобальными или локальными минимумами.

Согласно второй теореме об устойчивости функционала [18] производство энтропии и его производную можно оценить некоторыми числами сверху. Таким образом, перебирая различные значения параметра ε_0^* , можно получить различные средние значения функционала G_k^{*i} , которые будут ограничены двумя числами снизу (0 — равновесное состояние) и сверху.

Другие задачи. Материалы этой статьи были использованы нами также для интерпретации результатов работы по решению задачи о динамике тока одиночных ионных каналов биомембран [19]. В этой задаче также получено нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка, аналогичное (25), с запаздыванием и релаксацией при периодическом воздействии на ток в канале. В полученном уравнении введены следующие обозначения: $x^* = i^*$, $x_0^* = i_0^*$, $H_s^* = E_r^*$, $h_0^* = E_0^*$. Для этой задачи найдено производство энтропии в виде выражения (18) и условия знакоположительности производства энтропии, а также осуществляется переход к функционалу этой функции. Показана применимость сформулированной теоремы для данной задачи. Тем самым при решении нелинейных задач можно учитывать изложенный в статье общий подход к описанию систем различной природы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пригожин И. Р. От существующего к возникающему. — М.: Наука, 1985. — 296 с.
2. Журавлев В. А. Термодинамика необратимых процессов в задачах и решениях. — М.: Наука, 1979. — 136 с.
3. Бахарева И. Ф. Нелинейная неравновесная термодинамика. — Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1976. — 138 с.
4. Быстрай Г. П. Термодинамика открытых систем: Учеб. пособие. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2007. — 120 с.
5. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
6. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. — М.: Наука, 1984. — 829 с.
7. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. — М.: Мир, 1984. — Т. 1. 350 с.; Т. 2. 285 с.
8. Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. — М.: Мир, 1989. — 423 с.
9. Быстрай Г. П. Метод функций Ляпунова в анализе открытых термодинамических систем // Вестн. кибернетики. — 2005. — № 4. — С. 122–137.
10. Томпсон Дж. М. Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. — М.: Мир, 1985. — 254 с.
11. Колмановский В. Б., Носов В. Р. Устойчивость и периодические режимы регулируемых систем с последействием. — М.: Наука, 1981. — 448 с.
12. Красовский Н. Н. Некоторые задачи теории устойчивости движения. — М.: Физматгиз, 1959. — 211 с.
13. Красовский Н. Н., Котельникова А. Н. Судьба одного подхода к изучению наследственных систем // Изв. Урал. ун-та. — 2004. — № 32. — С. 12–24.
14. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1984.
15. Быстрай Г. П. Детерминированный хаос в нелинейных задачах теплофизики // Материалы Второй всерос. науч. интернет-конф. «Компьютерное и математическое моделирование в естественных и технических науках». — Тамбов: Изд-во Тамб. ун-та, 2001. — Вып. 1. — С. 3–9. — Режим доступа: www.tsureports.chat.ru, свободный.

16. Быстрая Г. П., Богинич А. В. Термодинамика многоядерных клеток: системное моделирование самоорганизующегося саркомера с хаотической динамикой параметра порядка // Вестн. кибернетики. — 2007. — № 6. — С. 77–91.

17. Быстрая Г. П., Макаров Л. В., Шилин Г. Ф. Неравновесная термодинамика процессов горного производства. — М.: Недра, 1991. — 119 с.

18. Ким А. В. Ко второму методу Ляпунова для систем с последействием // Диф. уравнения. — 1985. — Т. 21, № 3. — С. 385–391.

19. Быстрая Г. П., Ворох А. С., Андреев С. В. Детерминированный хаос в динамике тока одиночных ионных каналов биомембран // Биофизика. — 2005. — Т. 50, № 5. — С. 851–861.

G. P. Bystrai, S. A. Okhotnikov

ONE OF THE APPROACHES REGARDING MATHEMATICAL MODELLING
OF NONLINEAR PROCESSES

The article describes thermodynamics of nonlinear processes, considering fundamental (basic) first-order thermodynamic equations – relaxation local equations with a view to thermodynamic forces and flows. Subject to stating and proving being a theorem which is analogous to Prigozhin's for nonlinear systems and connected with drift/diffusion toward local/global minimum and structural stability of the studied nonlinear systems. They quote instances of applying the given approach to biological systems.