

НЕЭНТРОПИЙНЫЕ КРИТЕРИИ ЭВОЛЮЦИИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

Д.т.н., проф. В. Эткин

Вскрывается неприменимость энтропийных критериев эволюции к процессам самоорганизации термодинамических систем и предлагаются неэнтропийные критерии их упорядоченности, основанные на непосредственном представлении термодинамических потенциалов через параметры неравновесности

Введение. Научная революция XX столетия привела к пониманию того, что природе присуща не только разрушительная, но и созидательная тенденция. Накопилось достаточно фактов, свидетельствующих о том, что разномасштабные системы, изучаемые различными научными дисциплинами, имеют единый алгоритм перехода в более сложные и более упорядоченные состояния. Это потребовало и единого теоретического описания подобных процессов во времени и в пространстве. Возникло новое научное направление, получившее название *синергетики* (от греческого «синерген» – содействие, сотрудничество) [1].

Однако исследования в этой области наталкиваются на серьезные трудности, связанные с отсутствием критериев эволюции, более адекватных существу дела, нежели энтропия и основанные на ней потенциалы типа свободной энергии Гельмгольца F или свободной энтальпии Гиббса G . Довольно очевидно, что упорядочивание какой-либо системы является следствием подвода к ней упорядоченной формы энергии, т.е. совершения над ней полезной работы [2–4]. Между тем термодинамическая энтропия является параметром, который не изменяется в результате совершения такой работы и может только возрастать вследствие каких-либо необратимых процессов [5,6]. По этой причине разность $S - S_0$ между энтропией равновесного состояния S_0 и его текущим значением S не может служить мерой «упорядоченности» системы, а стремление исследователей использовать энтропийные критерии эволюции для анализа процессов упорядочивания («самоорганизации») является попыткой с заведомо негодными средствами [7]. Они приводят к выводу, что такие процессы являются следствием подвода к системе антипода энтропии – «неэнтропии». В результате исследователи приходят к выводу о «вопиющем противоречии между эволюцией природы по второму началу термодинамики и теорией биологической эволюции» [8].

О принципиальной неприменимости энтропийных критериев эволюции к процессам самоорганизации свидетельствует их неспособность отразить упорядочивание системы по одним степеням свободы неравновесной системы, и ее разупорядочивание – по другим. Между тем именно таковы реальные процессы самоорганизации в системах, где наблюдаются колебательные процессы типа циклических химических реакций Белоусова – Жаботинского (химических часов), системах типа хищник – жертва, когда рост одних популяций сопровождается угнетением других, и т.п. Эти процессы сопровождаются очевидным ростом упорядоченной энергии одних форм организации коллективных степеней свободы (в том числе – популяций), и уменьшением ее у других. В таких системах энтропия отражает лишь суммарный результат всей совокупности подобных процессов, который будет заведомо односторонним, если хоть один из этих процессов или хотя бы одна из его стадий сопровождается диссипацией. По этой причине возникает необходимость отыскания иных, неэнтропийных критериев эволюции, способных отразить все детали сложного процесса самоорганизации.

Неэнтропийные критерии эволюции неравновесных систем. Понимание того, что мир не укладывается в рамки классической термодинамики и статистической физики, вынуждает искать критерии эволюции, более адекватные существу дела. Известно, что какие-либо самопроизвольные процессы возникают лишь в отсутствие в системе равновесия и протекают в направлении установления этого равновесия. Следовательно, критерии эво-

люции следует выразить через параметры, характеризующие *отклонение* системы от этого состояния. Это и делает термокинетика ²⁾, вводящая наряду с обычными термостатическими переменными Θ_i (энтропией S , объемом V , массой k -го вещества M_k , электрическим зарядом Θ_e ; импульсом k -го компонента $\mathbf{P}_k = M_k \mathbf{v}_k$ и т.д.) дополнительные параметры пространственной неоднородности – векторы смещения \mathbf{R}_i , характеризующие отклонение центра распределения параметра Θ_i от его положения при равновесном (однородном) состоянии. В таком случае закон сохранения энергии в поливариантной системе с произвольным числом неравновесных степеней свободы n ($i = 1, 2, \dots, n$) принимает вид [9]:

$$dU \equiv \sum_i \Psi_i d\Theta_i - \sum_i \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{R}_i, \quad (1)$$

где U – внутренняя (собственная) энергия системы; $\Psi_i \equiv (\partial U / \partial \Theta_i)$ – усредненные потенциалы пространственно неоднородной системы (ее абсолютная температура T и давление p , химический потенциал k -го компонента μ_k и его скорость \mathbf{v}_k , электрический потенциал области ϕ и т.п.); $\mathbf{F}_i \equiv -(\partial U / \partial \mathbf{R}_i)$ – силы i -го рода в их обычном (ньютоновском) понимании, отражающие в данном случае стремление системы к установлению внутреннего равновесия.

Вторая сумма выражения (1) выделяет ту часть E энергии системы U , которая способна совершать полезную внешнюю (упорядоченную) работу. Эта часть близка по смыслу к *эксергии* ³⁾, если систему и окружающую ее среду рассматривать как единое целое. В общем случае реальных (необратимых) процессов убыль упорядоченной энергии определяет сумму всех видов полезной внешней W_i^e и диссипативной W_i^d работы, т.е.

$$-dE = \sum_i \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{R}_i = \sum_i dW_i^e + \sum_i dW_i^d. \quad (2)$$

Особенностью предложенного способа классификации энергии является деление ее на упорядоченную E и неупорядоченную $U - E$ части [10,11]. При этом упорядоченная часть энергии системы E выражена непосредственно через параметры пространственной неоднородности системы, т.е., в отличие от энергии Гельмгольца $F = U - TS$ или Гиббса $G = H - TS$, по «прямому балансу» (а не как часть внутренней энергии U или энтальпии H системы за вычетом связанной энергии TS). Это позволяет обобщить классический термодинамический метод потенциалов на пространственно неоднородные системы, единственно способные к совершению упорядоченной работы.

Преимущества энергии как меры упорядоченности системы. Представление термодинамических потенциалов через параметры неравновесного состояния \mathbf{F}_i и \mathbf{R}_i дает целый ряд преимуществ. Прежде всего, эти параметры могут быть найдены для *любого текущего состояния системы* по известным функциям распределения энергоносителя Θ_i и уравнениям состояния системы. Это позволяет предсказывать их изменение в различных процессах без проведения каких-либо расчетов. Поскольку в состоянии равновесия система не способна совершать никакой работы (ни внешней, ни внутренней), убыль упорядоченной энергии может служить надежным критерием приближения такой системы в целом к равновесию [9]

$$dE = - \sum_i \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{R}_i < 0. \quad (3)$$

²⁾ Теория, находящаяся в таком же соотношении с классической термодинамикой, как динамика к статике, т.е. обобщающая ее на неравновесные (в том числе пространственно неоднородные) среды с протекающими в них нестатическими процессами.

³⁾ Этот термин предложен З. Рантом (1955) для обозначения максимальной полезной внешней работы, которую может совершить система при обратимом характере процесса до установления равновесия с окружающей средой.

Далее, выражение (3) позволяет проследить за эволюцией каждой i -й степени свободы системы в отдельности, фиксируя приближение к равновесию одних из них

$$dE_i = - \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{R}_i < 0. \quad (4)$$

и удаление от равновесия других:

$$dE_j = - \mathbf{F}_j \cdot d\mathbf{R}_j > 0. \quad (5)$$

Представление упорядоченной энергии каждой степени свободы системы через ее параметры \mathbf{F}_i и \mathbf{R}_i позволяет ввести чрезвычайно важное для поливариантных систем понятие *частичного* (неполного, текущего) равновесия как состояния, отвечающего условию

$$dE_i = - \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{R}_i = 0. \quad (6)$$

При этом легко сформулировать критерий самопроизвольности процесса. Согласно принципу самоненаушимости равновесия (общему началу термодинамики), процессы отклонения системы от состояния равновесия не могут быть самопроизвольными. Это означает, что *любой самопроизвольный процесс всегда направлен на установление равновесия данного рода*. Это очевидное положение позволяет отличать естественные процессы от «индуцированных» (вынужденных). К последним относятся так называемые «сопряженные» химические реакции, «индуцированные» самопроизвольными реакциями (направленными к равновесию) и идущие в направлении удаления от химического равновесия. Последнее весьма важно при анализе процессов упорядочивания в одних частях или степенях свободы поливариантных систем и их «разупорядочивания» – в других. Таковы, в частности, циклические реакции Белоусова–Жаботинского («химические часы»). Важно это и для понимания причин возникновения колебательных процессов и процессов «кругооборота» вещества и энергии в природе [9].

Характерно, что критерии (3)...(6) допускают возможность развития системы, минуя состояние равновесия. Таковым представляется эволюция Вселенной, протекающая в режиме непериодических незатухающих колебаний в ее отдельных областях, что вполне естественно в условиях запаздывания сил реакции (отклика) со стороны других областей бесконечной Вселенной. При этом знак изменения dE_j для отдельных степеней определяется исключительно опытным путем как одно из условий однозначности той или иной задачи, вытекающих из свойств системы.

Безусловным преимуществом упорядоченной энергии перед энтропией является также полная определенность ее абсолютного значения любой ее составляющей E_j в состоянии частичного равновесия, в то время как для энтропии эти значения неизвестны. Это позволяет ввести уникальные критерии упорядоченности как системы в целом [11]

$$\eta_i \equiv E/U, \quad (7)$$

так и каждой ее степени свободы в отдельности:

$$\eta_i \equiv E_i/U_i. \quad (8)$$

Обращает на себя внимание также простой и ясный физический смысл упорядоченной энергии как величины, характеризующей способность системы к совершению упорядоченной работы. Таким образом, введение параметров пространственной неоднородности \mathbf{F}_i и \mathbf{R}_i , не зависящих от энтропии, дает в руки исследователей весьма удобный, «физичный» и универсальный критерий эволюции поливариантных систем, оставляющий да-

леко позади возможности энтропии. Наличие такого критерия подчас кардинальным образом изменяет результаты термодинамического анализа.

Покажем теперь это на конкретных примерах. Одним из них относится к процессу выращивания монокристаллов определенной формы из растворов и расплавов. В данном случае роль силы \mathbf{F}_i в выражении (4) играет поверхностное натяжение j -й грани монокристалла σ_j , а координаты \mathbf{R}_i – ее поверхность f_j ($j = 5, 6, \dots$). В таком случае из (4) можно получить закон Вульфа, согласно которому скорость нарастания отдельных граней монокристалла пропорциональна удельным поверхностным свободным энергиям этих граней, так что равновесная форма монокристалла характеризуется определенным соотношением поверхностного натяжения граней σ_j и их удаления h_j от так называемой «точки Вульфа» (общей вершины пирамид, построенных на этих гранях) $\sigma_j/h_j = \text{const}$ [12].

В качестве другого примера можно привести самопроизвольный процесс установления единой ориентации осей вращения тел, начиная от системы ядерных спинов ряда кристаллических веществ до гироскопов и орбит галактик. В этом случае работу W_i в выражении (4) удобнее представить в виде скалярного произведения крутящего (ориентационного) момента \mathbf{M}_e на элементарный угол поворота осей вращения $d\phi_e$. При этом можно показать, что критерию (4) в отсутствие других (возмущающих) воздействий удовлетворяет условие $\phi_e = \text{const}$, отвечающее исчезновению прецессионного движения вращающихся тел и минимуму кинетической энергии их вращения [12].

Еще одним примером самопроизвольных процессов, носящих с позиции энтропийных критериев «антидиссипативный» характер, является процесс перераспределения масс во Вселенной под действием сил гравитации. В данном случае силы \mathbf{F}_i в выражении (4) имеют смысл сил притяжения между небесными телами, а параметр \mathbf{R}_i – координаты центра масс рассматриваемой совокупности этих тел. В таком случае можно показать, что критерию (4) удовлетворяет неоднородное распределение масс. К нему приводит, в частности, известный астрофизикам процесс аккреции (захвата звездой вещества из близлежащих небесных тел), который приводит к уменьшению гравитационной энергии рассматриваемой совокупности тел и удалению ее от однородного состояния (соответствующего максимуму энтропии) [12]. В этом и состоит ответ на вопрос, каким образом в окружающем нас мире может сохраняться определенный порядок, несмотря на явную необратимость реальных процессов.

В качестве дополнительных примеров различного поведения энтропийных и энергетических критериев эволюции можно привести процессы самопроизвольного образования кристаллов льда в переохлажденной жидкости или выпадение осадка в пересыщенном растворе, сопровождающиеся повышением их температуры и возрастанием энтропии, и одновременно – упорядочением их микроструктуры. Так, недавно ученые из университета имени Фурье и института Лауэ-Ланжевена (Франция) получили вещество, которое затвердевает при нагреве и плавится при охлаждении, что указывает на возможность противоположного изменения термодинамической и статистико-информационной энтропии. Таким образом, самопроизвольное приближение системы к фазовому равновесию отнюдь не всегда ведет к нарастанию «хаоса» в системе как целом, а, напротив, может сопровождаться ее упорядочиванием [12].

Пусть, далее, мы имеем дело с некоторым телом, подвергшимся неравномерному нагреву. В этом процессе внутренняя энергия системы U и ее энтропия S возрастают. Однако наряду с этим в системе появляются области с различной температурой, одни из которых могут служить источником, а другие – приемниками тепла. Благодаря этому изначально термически однородная система становится способной выполнять роль автономной (независимой от окружающей среды) тепловой машины, т.е. совершать некоторую полезную работу. Это означает появление у рассматриваемой системы упорядоченной составляющей внутренней тепловой энергии. В этом примере результаты анализа с помощью энтропийных и энергетических критериев *противоположны*, свидетельствуя о том, что в пространственно неоднородных средах энтропия не является однозначной мерой хаоса.

В качестве еще одного примера рассмотрим процесс установления равновесия системы с окружающей средой. Классическая термодинамика рассматривала такую среду как внутренне равновесную (пространственно однородную). В таком случае установление

внешнего равновесия системы означало прекращение процессов внутри системы, т.е. наступление *внутреннего* равновесия. Однако положение изменяется, если внешняя среда пространственно неоднородна, как это имеет место в действительности. В таком случае установление равновесия с окружающей средой означает *нарушение равновесия внутри системы* и возникновение в ней определенного порядка («самоупорядочивание» системы). Такого рода процессы имеют прямое отношение к эволюции биосистем в связи с непериодическими изменениями внешних геомагнитных, электростатических, гравитационных, электромагнитных, температурных и т.п. полей в окружающей нас среде. Как видим, установление внешнего равновесия отнюдь не ведет к возрастанию в системе «хаоса», как это следует из энтропийных критериев эволюции рассматриваемой «расширенной» системы.

Использование понятия упорядоченной энергии E как «параметра порядка», не зависящего от энтропии, сразу обнаруживает несостоятельность попыток объяснить функционирование биосистем поддержанием в них баланса энтропии путем подвода к ней «негэнтропии» (синтропии). Если сопоставить количество упорядоченной энергии, необходимое для поддержания биоорганизмов в неравновесном состоянии, с количеством связанной энергии, выводимой из организма, то у холоднокровных животных (для которых отвод энтропии с инкрементами является единственным способом отвода связанной энергии) последнее окажется намного меньшим того, что требовалось бы по условиям баланса энтропии. Тем самым еще раз подтверждается то обстоятельство, что поддержание упорядоченного состояния биосистем обеспечивается отнюдь не отводом энтропии, а потоком извне упорядоченной («свободной») энергии [2-4]. Это расставляет все по своим местам: возрастание упорядоченной энергии за счет уменьшения энергии неупорядоченной является запрещенным процессом, противоречащим законам термодинамики. Последнее свидетельствует о некорректности использования понятия «негэнтропии» как синонима «упорядоченности». Поэтому применение энтропии и ее антипода – «негэнтропии» в качестве инструмента анализа проблем эволюции и самоорганизации в современных условиях можно объяснить лишь неосведомленностью исследователей или их упорным нежеланием взять на себя труд приведения термодинамики в соответствие с кругом решаемых задач.

Литература

1. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980.
2. Руденко А. П. Теория саморазвития открытых каталитических систем. – М., Наука, 1969.
3. Рубин А.Б. Термодинамика биологических процессов. – М.: МГУ, 1984.
4. Гладышев Г.П. Термодинамика и макрокинетика природных иерархических процессов. – М.: Наука, 1988.
5. Гухман А.А. Об основаниях термодинамики. –М.: Энергоатомиздат, 1986.
6. Базаров И.П. Термодинамика. Изд. 4–е. М.: Высшая школа, 1991.
7. Эткин В.А. Многоликая энтропия. //Вестник Дома ученых Хайфы, 2007.Т.11. – С.15-20.
8. Пригожин И. Время, структура и флуктуации (нобелевская лекция по химии 1977 года). // Успехи физических наук, 1980. – Т. 131. – С.185...207.
9. Эткин В.А. Термокинетика (термодинамика неравновесных процессов переноса и преобразования энергии. Тольятти, 1999, 228 с.
10. Техническая работоспособность неравновесных систем //Сибирский физико–технич. журнал, 1991. – Вып.6. – С.72...76.
11. Эткин В.А. Эксергия как критерий эволюции, равновесия и устойчивости термодинамических систем. // ЖФХ, 1992. – Т.66. –№ 5. – С. 1205...1212.
12. Эткин В.А. О термодинамической направленности процессов самоорганизации. <http://zhurnal.lib.ru/e/etkin_w_a>.