

ВТОРОЕ НАЧАЛО ТЕРМОДИНАМИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКОСИСТЕМ

Сайханов М.Б.¹, Гагаева З.Ш.¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова» Российской академии наук, Грозный, Россия, (364051, г. Грозный, Старопромысловское шоссе, 21а), e-mail: saikhanov_musa@mail.ru

На основе второго начала термодинамики для открытых систем и ранее сформулированного одним из авторов данной работы принципа минимального производства энтропии на нестационарный случай рассматривается возможность термодинамического и кинетического моделирования экосистем. Показано, что принципиальная возможность такого теоретического описания связана, прежде всего, с существованием соответствия критериев возникновения и устойчивого существования живых систем в экосистемах и диссипативных структур в неравновесных системах. При этом термодинамическое моделирование имеет место для состояний неравновесной системы вблизи равновесия. В этом случае вся неравновесная система по причине неоднородности её энергетического спектра разбивается на локально равновесные подсистемы. Для состояний, далёких от равновесного, в большей степени необходимо учитывать кинетический аспект (кинетику переноса энергии и частиц между подсистемами). Соответственно, разбиение неравновесной системы необходимо осуществлять на локально неравновесные (стационарные) подсистемы.

Ключевые слова: экосистема, открытая система, второе начало термодинамики, диссипативная структура, квантование неравновесной системы, термодинамическая и кинетическая устойчивость, сильнонеравновесная нестационарная система, кинетическое моделирование, управляющее уравнение.

SECOND LAW OF THERMODYNAMICS AND ECOSYSTEM MODELING

Saikhanov M.B.¹, Gagaeva Z.S.¹

¹Complex Institute n.a. Kh.I. Ibragimov of the Russian Academy of Sciences, Grozny, Russia (364051, Grozny, Staropromyslovsky Avenue, 21a), e-mail: saikhanov_musa@mail.ru

The possibility of thermodynamic and kinetic ecosystem modeling is considered on base of second law of thermodynamics for open systems and previously formulated by one of the authors of this paper the principle of minimum entropy production to the nonstationary case. It is shown that the principle possibility of the same theoretical description is connected with the existence of correspondence criteria of appearance sustainable existence of living systems in ecosystems and dissipative structures in nonequilibrium systems. At that the thermodynamic modeling takes place for states of nonequilibrium system near equilibrium. In that case all nonequilibrium system (by reason of heterogeneity of its energy spectrum) is divided into locally equilibrium subsystem. For states far from equilibrium it is necessary to consider the kinetic aspect (kinetics of transport of energy and particles between the subsystems). In that case the decomposition of nonequilibrium system should be realized to locally nonequilibrium (stationary) subsystem.

Keywords: ecosystem, open system, the second law of thermodynamics, dissipative structure, quantization of nonequilibrium system, thermodynamic and kinetic stability, strongly nonequilibrium system, kinetic modeling, control equation.

Земная поверхность на протяжении тысячелетий остается объектом исследования и жизненных интересов человека. Развитие философских взглядов первых веков новой эры ознаменовалось подходами к природе как к единому целому, состоящему из частей (элементов). При этом целое обладает не просто суммой свойств, характеризующих его части, но и рядом новых, присущих только целому.

К концу XIX - началу XX в. научное сообщество осознает, что к решению научных и хозяйственных проблем необходимо подходить с позиций целостности природы, основанной на всеобщих связях явлений. В классическом труде В.В. Докучаева «Наши

степи прежде и теперь» (1892) сформулированы идеи целостности природы, взаимодействия естественных и антропогенных составляющих. Развивая эти идеи, он отмечал, что существенную роль в природе играют не отдельно взятые природные тела и явления, а их соотношение и закономерная связь. Им были сформулированы общие положения о природных зонах [2].

Объективные законы развития науки и общества привели к оформлению общей теории систем, ставшей концептуальной основой, поворотным моментом в исследованиях как природных, так и общественных явлений. А. Гумбольдт, К. Риттер и В.В. Докучаев одними из первых осознали необходимость применения единой теории для изучения сложных объектов и всего разнообразия природы в ее единстве. Заметным вкладом на пути создания такой теории явилась замечательная книга одного из создателей квантовой механики Э. Шредингера о физическом аспекте живой клетки, в которой затрагивается также и термодинамический аспект живой системы [8].

Экосистема, представляющая собой основную функциональную единицу (сообщество живых организмов и среду их обитания) в экологии, с термодинамической точки зрения является открытой неравновесной системой [5; 6]. При этом возникновение и устойчивое существование таких упорядоченных структур, как растения и живые организмы, поддерживается, во-первых, достаточно интенсивными потоками энергии и вещества извне, а во-вторых, наличием баланса между процессами их рассеяния внутри самой структуры и переноса в окружающую среду. Следует отметить, что этот общепризнанный в экологии критерий устойчивого существования экосистем удивительным образом соответствует критерию возникновения и устойчивого существования диссипативных структур, сформулированному на основе их кинетического моделирования как сильнонеравновесных вблизи стационарного состояния [5; 7].

Поэтому цель работы состоит в анализе некоторых основополагающих подходов в неравновесной термодинамике и экологии для последующего формирования единого теоретического описания экосистем. В частности, речь идёт о применении для этой цели метода кинетического моделирования неравновесных систем.

Неравновесная термодинамика и кинетическое моделирование

Рассмотрим сначала основные особенности метода кинетического моделирования неравновесных систем. Собственно, необходимость разработки этого метода была осознана Пригожиным уже в рамках неравновесной термодинамики при попытке описания состояний, далёких от равновесия, т.е. для сильнонеравновесной системы [6].

Для состояний, близких к равновесию, Онзагер дал математически и физически чёткое определение термодинамических потоков (J_k) и сил (X_k), сформулировал соотношение

взаимности для кинетических коэффициентов ($L_{ij} = L_{ji}$) и принцип минимального рассеяния энергии для стационарного состояния [9]. Аналогичный вариационный принцип для стационарного состояния вблизи равновесия удалось сформулировать и Пригожину, но уже в энтропийном представлении, а именно: принцип минимального производства энтропии. Этот принцип, как показал Дьярмати [3], эквивалентен принципу минимального рассеяния энергии, но более удобен для практического применения. Кроме того, принцип минимального производства энтропии оказался более перспективным в смысле дальнейших теоретических обобщений, в том числе для сильнонеравновесных систем. Важными результатами Пригожина являются также исследования устойчивости термодинамических систем через второй дифференциал производства энтропии, который в случае термодинамической устойчивости состояний является функцией Ляпунова

$$\lambda_s = \delta^2 S(\Delta\alpha_1, \dots, \Delta\alpha_i, \dots, \Delta\alpha_n), \quad (1)$$

где $\Delta\alpha_i = \alpha_i - \alpha_i^{eq}$ – отклонения локальных термодинамических параметров от их равновесных значений α_i^{eq} .

Однако указанные выше результаты и некоторые другие термодинамические результаты, связанные с ними, недостаточны для теоретического описания экосистем по той простой причине, что все они получены для области состояний неравновесной системы *вблизи* равновесного состояния, т.е. для слабонеравновесных систем. Поэтому их применение оправдано в том случае, если в локальных масштабах окружающей среды есть области, которые вследствие малости отклонений термодинамических параметров от их равновесных значений можно считать слабонеравновесными. В то же время живые организмы и экосистема в целом относятся к классу сильнонеравновесных нестационарных систем.

Как установил Пригожин, именно для сильнонеравновесных систем значительную роль начинают играть *кинетические* характеристики, которыми при термодинамическом рассмотрении являются избыточные величины потоков δJ_k , сил δX_k и полного производства энтропии $\delta_X P$ (здесь индекс означает, что изменение полного производства энтропии осуществляется за счёт изменения термодинамических сил X), представляющих отклонения соответствующих параметров от их равновесных *стационарных* значений [6]. При этом устойчивые, неустойчивые и нейтральные (т.е. граничные) состояния системы характеризуются, соответственно, положительным ($\delta_X P > 0$), отрицательным ($\delta_X P < 0$) и равным нулю ($\delta_X P = 0$) значениями избыточного производства энтропии. Кинетические процессы, т.е. процессы переноса энергии и частиц внутри системы и за её пределы, имеют

место во всех трёх состояниях устойчивости, но в наиболее выраженной форме – вдали от равновесного состояния. По Пригожину, диссипативные структуры также могут возникать только в сильнонеравновесных системах в области неустойчивых состояний вблизи границы устойчивости и в дальнейшем в ходе неравновесной эволюции могут трансформироваться (изменять размеры и структуру).

Кинетическое моделирование экосистем

Необходимо отметить, что, разрабатывая термодинамику неравновесных систем, в концептуальном плане Пригожин исходил из идеи *локального равновесия*, заключающейся в существовании в неравновесной системе локально равновесных состояний вследствие избирательного взаимодействия её элементов, образующих, таким образом, квазиравновесную подсистему. Вблизи равновесного состояния энергетические состояния элементов квазиравновесной подсистемы и всей неравновесной системы не имеют большого разброса. Поэтому их энергетические спектры, с физической точки зрения, можно считать непрерывными. Это позволяет путем интегрирования локальных параметров получать глобальные (относящиеся ко всей системе), как это и делается в неравновесной термодинамике Пригожина.

Совершенно иначе дело обстоит для неравновесной системы вдали от равновесного состояния, когда её энергетический спектр становится неоднородным, а именно: дискретно-непрерывным [10]. Непрерывность энергетического спектра при этом сохраняется в квазиравновесных подсистемах, а дискретность появляется вследствие заметного различия (удаленности) их энергетических спектров между собой. В результате мы приходим к двухуровневой модели теоретического описания сильнонеравновесной системы, в которой на локальном уровне осуществляется термодинамическое (статистическое) описание, а на глобальном уровне всей системы – *кинетическое моделирование*. Попутно отметим, что в экологии при анализе границ и пространственного расположения экосистем также возникают вопросы о дискретности или непрерывности её структуры [4].

Дальнейший прогресс продвижения этой концепции в неравновесной термодинамике был осуществлён в работах [10] с учётом следующих актуальных с точки зрения кинетического моделирования вопросов: 1) необходимость введения, наряду с неравновесными локальными термодинамическими параметрами, также и *нестационарных* параметров – как скоростей изменения первых; 2) построение модифицированного (проквантованного) функционала полного производства энтропии неравновесной системы; 3) исследование кинетической устойчивости сильнонеравновесных систем; 4) формулировка соответствующего вариационного принципа для эволюции неравновесной нестационарной

системы; 5) применение кинетического моделирования для описания конкретных неравновесных нестационарных систем.

Решение этих и некоторых других вопросов позволило, в частности, выяснить детальный механизм кинетического аспекта неравновесной системы, который внутри системы реализуется через кинетическое взаимодействие квазиравновесных или квазистационарных подсистем, а за её пределами – за счет кинетического взаимодействия самой системы с окружающей средой. Под кинетическим взаимодействием, в данном случае, мы подразумеваем процессы взаимных переходов энергии и частиц, т.е. потоки между подсистемами, которые обусловлены наличием соответствующих градиентов термодинамических сил. Замечательно, что именно по такому кинетическому сценарию осуществляется процесс эволюции экосистем, которые в неравновесной термодинамике относят к классу так называемых сложных систем [5]. Следует также отметить, что при кинетическом моделировании поведение неравновесной системы на глобальном уровне, т.е. на уровне системы в целом, детерминировано, в то время как на локальном уровне подсистем такая детерминация имеет место не всегда. Этот вывод, полученный при кинетическом моделировании из теоретических соображений, находит своё подтверждение при исследовании экосистем [5; 7].

Управляющее уравнение эволюции

Детерминированность эволюции неравновесной нестационарной системы на глобальном уровне, с физической точки зрения, обусловлена *инертностью необратимого процесса*, сопутствующего ей. Математически это выражается минимумом избыточного производства энтропии на всём временном отрезке [10]:

$$\delta(\delta_{x\dot{x}} P) = 0. \quad (2)$$

Здесь второй индекс указывает на то, что изменение полного производства энтропии может осуществляться также и за счёт изменения нестационарных локальных параметров. Вариационное уравнение (2) можно записать и в несколько ином виде, более удобном при решении практических задач:

$$\delta \int_{t_0}^t \partial_{x\dot{x}} P / \partial t = 0, \quad (3)$$

где t_0 и t – начальный и текущий моменты времени при нестационарной эволюции системы. Функционал полного производства энтропии в уравнении (3) зависит от неравновесных и нестационарных локальных параметров и имеет вид

$$P = P(X_1^1, \dots, X_i^j, \dots, X_n^m, \dot{X}_1^1, \dots, \dot{X}_i^j, \dots, \dot{X}_n^m). \quad (4)$$

В правой части равенства (4) (в скобках) записаны соответствующие неравновесные и нестационарные локальные параметры системы. При этом нижний индекс означает номер

необратимого процесса, а верхний – число подсистем в неравновесной нестационарной системе. Отметим, что неравновесная система имеет две *стандартные* (нулевые) точки, по отношению к которым ведется отсчёт либо неравновесных характеристик, либо нестационарных. В первом случае это *равновесное состояние системы*, а во втором – *стационарное*. Поэтому для состояний, близких к равновесию, под неравновесными параметрами X_i^j следует подразумевать отклонения термодинамических сил от их равновесных значений. В этом случае мы имеем локально равновесные состояния (квазиравновесные подсистемы), что соответствует термодинамическому моделированию неравновесной системы. Однако для состояний системы, далёких от равновесия и особенно неустойчивых (например, для диссипативных структур), в локальном масштабе образуются уже не квазиравновесные подсистемы, а *квазистационарные*. В этом случае в качестве локальных неравновесных параметров следует использовать градиенты термодинамических сил, что соответствует кинетическому моделированию неравновесной системы [7].

Отметим также, что при решении конкретных задач при кинетическом моделировании экосистем управляющее уравнение (3) необходимо применять с учётом ограничивающих условий, налагаемых на локальные и глобальные параметры системы. Например, при кинетическом моделировании климата необходимо учитывать динамику суммарной солнечной энергии, поступающей в биосферу Земли, а также такие факторы, как вариация длительности физических суток, движение атмосферы и другие экспериментально и теоретически установленные динамические закономерности [1].

Заключение

В настоящее время ни у кого из исследователей не вызывает сомнения, что объём и сложность задач, которые предстоит решить в области экологии, весьма велики. Примечательно, что для их решения привлекаются передовые достижения и идеи из естественно-научных, технических, гуманитарных и социальных направлений исследований. Среди них современные исследования в области физики, в том числе отечественные разработки, занимают не последнее место. Однако число моделей на самом деле слишком велико, и они зачастую не согласованы между собой единым подходом, который должен быть достаточно общим, современным, точным и понятным.

Если говорить о точных науках, таких как физика, химия, биология, геология и т.д., то объединяющей их дисциплиной, несомненно, является термодинамика. Очевидно, это обусловлено степенью общности её основополагающих законов, и прежде всего первого и второго начал. При этом особый интерес имеет второе начало в связи с тем, что только на его основе удастся осуществить теоретическое описание процесса эволюции открытых неравновесных систем. Метод кинетического моделирования имеет непосредственное

отношение ко второму началу термодинамики и, по существу, является его обобщением на нестационарный случай, когда рассматривается временной аспект необратимого процесса в неравновесной системе. Авторы надеются, что данная работа будет полезной для формирования вышеуказанного объединяющего подхода в экологии, а также для моделирования конкретных экосистем.

Список литературы

1. Бялко А.В. Спектр возмущений земных суток // Природа. – 2013. - № 8. – С. 63.
2. Докучаев В.В. К учению о зонах природы. Избр. соч. - М. : Сельхозгиз, 1949. - Т. III. – С. 317-329.
3. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика / пер с англ.; под ред. В.К. Семенченко. – М. : Мир, 1974. – 304 с.
4. Кафанов А.И. Континуальность и дискретность живого покрова: проблемы масштабов // Журнал общей биологии. – 2006. – Т. 67. - № 4. – С. 311.
5. Одум Ю. Экология. – М. : Мир, 1986. – Т. 1. - 328 с.
6. Пригожин И. От существующего к возникающему. – М. : Наука, 1985. – 217 с.
7. Сайханов М.Б. Кинетическое моделирование диссипативных структур // Нелинейный мир. – 2013. – Т. 11. - № 1. – С. 44.
8. Шредингер Э. Что такое жизнь? Физический аспект живой клетки. – Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 1999. – 96 с.
9. Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes // Phys. Rev. – 1931. - V. 37. – P. 405; V. 38. – P. 2265.
10. Saikhanov M.B. Quantization of Nonequilibrium Nonstationary system // Int. J. Mod. Phys. – 2012. - Vol. 26. - No. 12.

Рецензенты:

Умаров М.У., д.б.н., доцент, зав. лабораторией экологии Комплексного научно-исследовательского института им. Х.И. Ибрагимова Российской академии наук (ФАНО), г.Грозный.

Керимов И.А., д.ф.-м.н., профессор, зав. отделом геологии, геофизики и геоэкологии Комплексного научно-исследовательского института им. Х.И. Ибрагимова Российской академии наук (ФАНО), г. Грозный.