

**ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СИСТЕМАХ МНОГИХ ЧАСТИЦ:  
ОТ ФИЗИКИ И ХИМИИ ДО БИОЛОГИИ И ЭКОНОМИКИ****Н. И. Егоренков, М. Н. Стародубцева***Учреждение образования «Гомельский государственный  
технический университет имени П. О. Сухого», Беларусь*

Различают пять форм движения материи (материальных частиц): механическую, физическую, химическую, биологическую и сознательную (экономическую). Движения (процессы) описываются дифференциальными уравнениями. В случае механической формы движения частицы движутся независимо одна от другой – между ними нет сил взаимодействия (например, идеальный газ). Поведение механической системы многих частиц изучает статистическая механика, При этом используется классическая статистика (статистика независимых событий) и формальная логика. Такого рода системы являются линейными и описываются линейными дифференциальными уравнениями. Качественные изменения в них отсутствуют. Если же частицы обладают силовым полем, то их поведение становится взаимозависимым, кооперативным. Такие системы многих частиц являются нелинейными. Они описываются нелинейными дифференциальными уравнениями. При этом используется статистика зависимых событий (фрактальная статистика) и диалектическая (нелинейная, неформальная) логика. Это системы с обратной связью и ограниченными ресурсами. В такой системе плавное изменение внешних параметров может вызвать скачкообразное изменение ее свойств. Так как все реальные частицы обладают силовыми полями, а исключить взаимодействия в реальном мире принципиально невозможно, то реальные системы многих частиц являются нелинейными системами. Линеаризация их (механическая модель) является приближением к реальности, идеализацией реальной системы. Все нелинейные системы могут существовать в нескольких стационарных (установившихся) состояниях, а все нелинейные процессы являются ветвящимися. Различают состояния устойчивого (фазы) и неустойчивого равновесия (переходные от одной к другой фазе состояния). Нелинейные системы многих частиц изучают физика, химия, биология и общественные науки (например, экономика). Примеры нелинейных систем: физические – вещество (частицы – молекулы), биологические – популяции живых существ (частицы – вирусы, микробы, насекомые, животные), социальные – товарно-денежное хозяйство (частицы – хозяйствующие субъекты).

Механика материалов имеет дело с веществом. В реальных условиях механическое разрушение материала, является фазовым превращением, связанным с физическими или химическими процессами в веществе, протекающими при наложении на него внешнего силового поля. Оно может происходить по механизму фазового перехода первого рода (с образованием зародышей новой фазы – «молекул» пустоты).

Поведение систем многих частиц описывается уравнениями состояния, которые получают, дифференцируя их потенциальные функции и приравнивая полученные выражения нулю. Одно и то же уравнение может описывать разные по природе системы (например, вещество и товарно-денежное хозяйство [1]), т. к. материальные качества составляющих системы частиц в уравнение не входят.

Наибольших успехов в описании поведения систем многих частиц достигла молекулярная физика. Однако эти успехи весьма скромны. Для описания идеального газа в физике используется эмпирическое уравнение состояния Клапейрона-Менделеева, которое для одного моля записывается в виде:

$$pV = RT, \quad (1)$$

где  $p$  – давление,  $V$  – объем,  $T$  – абсолютная температура,  $R$  – газовая постоянная. Оно было модифицировано Ван дер Ваальсом:

$$(p + a/V^2)(V - b) = RT, \quad (2)$$

где  $b$  – собственный объем молекул,  $a/V^2$  – внутреннее давление, обусловленное силами взаимного притяжения молекул и направленное внутрь газа против давления, обусловленного кинетической энергией молекул. Его усовершенствовали Бертло  $(p + a/V^2T)(V - b) = RT$  и Дитеричи  $(p + a/V^{5/3})(V - b) = RT$ . В статистической физике предложено вириальное уравнение:

$$pV = RT(1 + B/V + C/V^2 + D/V^3 + \dots), \quad (3)$$

где зависящие от температуры коэффициенты  $B$ ,  $C$ ,  $D$  определяются через потенциал взаимодействия молекул.

Они учитывают парные, тройные и другие взаимодействия молекул. Это уравнение было выведено с помощью теоремы о вириале, а затем – методом Гиббса и Боголюбова. Вычисление вириальных коэффициентов выше третьего встречает непреодолимые трудности. Оно справедливо лишь для малых плотностей газа, вдали от критической точки. В уравнениях (1), (3) не учитывается объем молекул.

Для реальных газов установлено более 150 эмпирических уравнений состояния, но до сих пор «наиболее простым и качественно правильно передающим поведение реальных газов является уравнение Ван дер Ваальса» [2]. Вследствие этого оно широко используется на практике. Более того, дальнейший прогресс в описании поведения реальных газов при изменении их  $p$ ,  $V$  и  $T$  идет в основном по пути совершенствования этого уравнения путем введения дополнительных параметров. Предложены 2-х, 3-х-, 4-х- и 5-и параметрические уравнения как модификации уравнения Ван дер Ваальса [3].

Проблема теоретического описания поведения реальных газов, жидкостей и твердых тел, а тем более получения универсального уравнения, охватывающего твердое, жидкое и газообразное состояния молекулярной системы, остается пока неразрешимой в рамках ни статистической физики (микроскопического метода), ни термодинамики (макроскопического описания). Считается, что методами термодинамики даже вид уравнений состояния не может быть установлен [4].

Однако, надежда на получение универсального уравнения состояния появилась именно со стороны макроскопического метода (фактически – термодинамики) с созданием теории бифуркаций критических точек потенциальных функций (топологической теории катастроф) и фрактальной геометрии. Теория катастроф описывает качественные изменения нелинейных систем, их взаимосвязанные стационарные состояния, а фрактальная теория – динамику переходных состояний. Основные положения теории фазовых превращений естественным образом укладываются в рамки фрактально-топологической теории. Фазовым превращениям свойственны все признаки (флаги) катастроф: модальность, внезапные скачки, критическое замедление, аномальные изменения и др. [5].

Так как большинство нелинейных дифференциальных уравнений до сих пор аналитически неразрешимо, то их упрощают, ограничиваясь, соответственно, изуче-

нием потенциальных систем, для которых  $\frac{dx_i}{dt} = -\frac{\partial U(x; r)}{\partial x_i}$ , где  $x$  – переменные состояния, а  $r$  – внешние переменные,  $U$  – потенциальная функция [5].

Допустим, что уменьшение потенциальной энергии  $U$  системы пропорционально приросту ее переменной состояния  $x$  (например, объема системы  $V$ ) и значению  $U$ , которое соответствует величине  $x$ :  $\frac{\partial U}{\partial x} = -kU$  ( $k$  – константа скорости).

Такого рода изменения характерны для многих реальных процессов [6]. Тогда  $U = U_0 e^{-kx}$ .

Потенциальную функцию можно разложить в ряд (функцию  $U = U_0 e^{-kx}$  – в сходящийся от  $-\infty$  до  $+\infty$  знакочередующийся ряд). Для потенциальной функции с одной переменной состояния согласно теории бифуркаций критических точек потенциальных функций можно ограничиться усеченным рядом с высшим членом  $x^7$ , соответствующим набору пяти катастроф (складка, сборка, ласточкин хвост, бабочка и вигвам) [5]. Дифференцируя разложенную в усеченный ряд потенциальную функцию и приравнявая нулю результат, уравнение состояния системы (например, при  $k = 1$ ) можно записать в виде:

$$a_0 - a_1 x + a_2 x^2 - a_3 x^3 + a_4 x^4 - a_5 x^5 + a_6 x^6 = 0, \quad (4)$$

где  $a_0, \dots, a_6$  – коэффициенты, или

$$\left(a_6 + \frac{a_4}{x^2} - \frac{a_3}{x^3} + \frac{a_2}{x^4} - \frac{a_1}{x^5} + \frac{a_0}{x^6}\right)x = a_5. \quad (5)$$

Можно предложить два подхода к преобразованию полученных выражений для упрощенного описания эволюционирующей (развивающейся) системы.

*Первый* подход. Если потенциальная энергия системы продолжает уменьшаться, переходя в кинетическую энергию, а полная механическая энергия сохраняется постоянной (консервативная система), то процесс преобразования можно описать последовательным дифференцированием потенциальной функции системы. Это позволяет получить ряд из шести уравнений, который начинается с уравнения (4) и заканчивается уравнением

$$a_1 x = a_0. \quad (6)$$

*Второй* подход. Очевидно, что при увеличении  $x$  и (или)  $a_5$  дробные члены в уравнении (4) становятся незначимыми, что позволяет записать аналогичный по форме ряд из шести уравнений, который также начинается с уравнения (4), но заканчивается уравнением

$$a_6 x = a_5. \quad (7)$$

Когда потенциальная энергия полностью преобразуется в кинетическую энергию, то система описывается уравнениями (6), (7), т. е. нелинейная модель системы, заменяется в обоих случаях линейной (идеальной) моделью системы.

Основная трудность при попытке использовании уравнений состояния теории катастроф в физике состоит в идентификации управляющих параметров (коэффици-

ентов при переменных состояния), соотношения их с параметрами молекулярной системы [5]. Запись уравнений состояния в форме (5) при сопоставлении с эмпирическими уравнениями состояния позволяют преодолеть эту трудность.

Если за переменную состояния  $x$  в уравнениях (4)–(7) взять доступный для движения молекул объем  $V$ , то тогда в уравнениях (6), (7)  $a_1, a_6 = p$ ,  $a_0, a_5 = RT$ . Очевидно, что уравнения (6), (7) соответствуют уравнению (1) не только по форме, но и по существу (они являются уравнениями состояния идеальных систем). В этом случае выражение в скобках в уравнении (5) будет суммарным давлением ( $p$  – направленное наружу давление, связанное с движением молекул, совокупность дробных членов – направленное вовнутрь давление, связанное с притяжением молекул). Тогда уравнение состояния системы примет вид:

$$\left(p + \frac{a_4}{V^2} - \frac{a_3}{V^3} + \frac{a_2}{V^4} - \frac{a_1}{V^5} + \frac{a_0}{V^6}\right)V = RT. \quad (8)$$

Следующими в ряду для первого случая будут уравнения:

$$\left(p + \frac{a_3}{V^2} - \frac{a_2}{V^3} + \frac{a_1}{V^4} - \frac{a_0}{V^5}\right) = RT; \quad (9)$$

$$\left(p + \frac{a_2}{V^2} - \frac{a_1}{V^3} + \frac{a_0}{V^4}\right)V = RT; \quad (10)$$

$$\left(p + \frac{a_1}{V^2} - \frac{a_0}{V^3}\right)V = RT; \quad (11)$$

$$\left(p + \frac{a_0}{V^2}\right)V = RT, \quad (12)$$

а для второго случая:  $\left(p + \frac{a_4}{V^2} - \frac{a_3}{V^3} + \frac{a_2}{V^4} - \frac{a_1}{V^5}\right) = RT; \quad (13)$

$$\left(p + \frac{a_4}{V^2} - \frac{a_3}{V^3} + \frac{a_2}{V^4}\right) = RT; \quad (14),$$

$$\left(p + \frac{a_4}{V^2} - \frac{a_3}{V^3}\right) = RT; \quad (15)$$

$$\left(p + \frac{a_4}{V^2}\right) = RT. \quad (16)$$

Уравнение (8) преобразуется в уравнение:

$$pV = RT\left(1 - \frac{A}{V} + \frac{B}{V^2} - \frac{C}{V^3} + \frac{D}{V^4} - \frac{E}{V^5}\right), \quad (17)$$

аналогичное по форме вириальному уравнению, но качественно отличающееся от него (чередованием знаков у дробных членов и последовательным возрастанием значений их числителей).

В полевых (полученных на базе потенциальной функции – характеристики силового поля) уравнениях (8)–(17) не учитывается, что составляющие систему частицы имеют собственный объем. С учетом приходящейся на исключаемый из рассмотрения суммарный объем частиц  $b$  энергии  $pb$  уравнение (8) принимает вид:

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_4}{V} - \frac{a_3}{V^2} + \frac{a_2}{V^3} - \frac{a_1}{V^4} + \frac{a_0}{V^5} \right). \quad (18)$$

Продолжение ряда в первом случае:

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_3}{V} - \frac{a_2}{V^2} + \frac{a_1}{V^3} - \frac{a_0}{V^4} \right); \quad (19)$$

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_2}{V} - \frac{a_1}{V^2} + \frac{a_0}{V^3} \right); \quad (20)$$

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_1}{V} - \frac{a_0}{V^2} \right); \quad (21)$$

$$p(V - b) = RT - \frac{a_0}{V}, \quad (22)$$

а во втором случае:  $p(V - b) = RT - \left( \frac{a_4}{V} - \frac{a_3}{V^2} + \frac{a_2}{V^3} - \frac{a_1}{V^4} \right); \quad (23)$

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_4}{V} - \frac{a_3}{V^2} + \frac{a_2}{V^3} \right); \quad (24)$$

$$p(V - b) = RT - \left( \frac{a_4}{V} - \frac{a_3}{V^2} \right); \quad (25)$$

$$p(V - b) = RT - \frac{a_4}{V}. \quad (26)$$

Заключительным уравнением в обоих случаях будет:

$$p(V - b) = RT. \quad (27)$$

Очевидно, для консервативной системы в уравнениях (18)–(26)  $RT$  является полной механической энергией,  $p(V - b)$  – кинетической (совершающей работу) энергией, а сумма дробных членов в круглых скобках – потенциальной (ресурсной) энергией.

Если уравнение состояния реальных газов Ван дер Ваальса (2) переписать форме  $p(V - b) = RT - \left( \frac{a}{V} - \frac{ab}{V^2} \right)$ , то становится очевидным, что оно является модификацией уравнений (21), (25) в случае  $a_1, a_4 = a$  и  $a_0, a_3 = ab$ . Если в уравнение (19) дополнительно принять  $a_3 = c$ ,  $a_2 = cb$ , то оно приобретает более простую форму:

$$\left( p + \frac{c}{V^2} + \frac{a}{V^4} \right) (V - b) = RT. \quad (28)$$

Соответственно, уравнение (23) в случае  $a_2 = c$ ,  $a_1 = cb$  преобразуется:

$$(p + \frac{a}{V^2} + \frac{c}{V^4})(V - b) = RT. \quad (29)$$

Уравнения (28), (29) можно рассматривать как расширение уравнения (2), связанное с экстраполяцией принципа Ван дер Ваальса в область меньших  $V$  и  $T$ .

Так как уравнения (6), (7) и (27) описывают однофазную систему – газообразное состояние, уравнения (2), (21), (25) – двухфазную систему (жидкую и газообразную фазу), то по логике цепочки полученных уравнений уравнения (19), (23), (28), (29) должны описывать трехфазную систему (твердую, жидкую и газообразную фазу).

Поверхности состояний, описываемые уравнениями (2), (4)–(29), являются топологически эквивалентными (гомеоморфными). Дробные члены уравнений можно рассматривать как деформирующие поверхность состояний системы параметры (управляющие параметры), если  $p$ ,  $V$ ,  $T$  рассматривать как ее параметры порядка.

Коэффициенты дробных членов в уравнениях не являются строго постоянными, они слабо зависят от состояния системы (например, от  $T$ ), а сами дробные члены не исчезают полностью, а становятся всего лишь незначущими. Вследствие этого, ряд уравнений состояния системы, как ее упрощенных моделей, целесообразнее записывать как:

$$p(V - b) = RT - (\frac{A_1}{V} - \frac{A_2}{V^2} + \frac{A_3}{V^3} - \frac{A_4}{V^4} + \frac{A_5}{V^5}); \quad p(V - b) = RT - (\frac{B_1}{V} - \frac{B_2}{V^2} + \frac{B_3}{V^3} - \frac{B_4}{V^4});$$

$$p(V - b) = RT - (\frac{C_1}{V} - \frac{C_2}{V^2} + \frac{C_3}{V^3}); \quad p(V - b) = RT - (\frac{D_1}{V} - \frac{D_2}{V^2}); \quad p(V - b) = RT - \frac{E_1}{V} \text{ или}$$

$$(p + \frac{a}{V^2})(V - b) = RT; \quad (p + \frac{d}{V^2} + \frac{e}{V^4})(V - b) = RT.$$

Гомеоморфный ряд уравнений состояния проливает свет на то, почему эмпирическое уравнение Ван дер Ваальса является приближенным и в каком направлении можно его совершенствовать (кроме упрощений типа:  $a_1 = a$  и  $a_0 = ab$  и т. п.). Он показывает, что применимость его ограничивается взаимозависимыми значениями  $V$  и  $T$ , при которых становятся незначущими дробные члены более высокого, чем  $a/V^2$ , порядка, а улучшение описания молекулярной системы должно достигаться путем увеличения порядка уравнения, а не количества параметров в нем.

Так как в уравнениях (4)–(7) материальные характеристики частиц не оговариваются, то уравнения (8)–(29) справедливы, по нашему мнению, для любых систем.

Известно [1], что товарно-денежное хозяйство с совершенной конкуренцией (идеальная система) описывается уравнением состояния, аналогичным уравнению (1), т. е.  $pV = RT$ , где  $p$  – уровень цен, а  $V$  – объем потребительских товаров,  $R$  – масса (константа в равновесной экономике), а  $T$  – скорость обращения денег. Если учитывается объем  $b$  промежуточных товаров (средств производства, характеризующий «собственный объем» хозяйствующего субъекта, как «частицы» товарно-денежного хозяйства), то это уравнение приобретает вид уравнения (27)  $p(V - b) = RT$ , где  $V$  – суммарный объем потребительских (конечных) и промежуточных (использованных средств производства) товаров. Очевидно, что применительно к товарно-денежному хозяйству в уравнениях (18)–(26)  $RT$  является общим доходом,  $p(V - b)$  – суммой заработной платы и стоимости использованных средств производства (переменного  $v$  и постоянного  $c$  капитала по терминологии Маркса),

а сумма дробных членов в круглых скобках – прибавочной стоимостью  $m$  (частью дохода, которая не используется непосредственными товаропроизводителями). Уравнения (2) [1] и (18)–(26), (28), (29) описывают товарно-денежное хозяйство с несовершенной конкуренцией (частной формой производственной собственности).

Как следует из уравнения (18), при постоянной массе денег в обращении товарно-денежное хозяйство в пространстве переменных (объем и уровень цен товаров, скорость обращения денег, прибавочная стоимость) претерпевает фазовое расслоение и может существовать в шести стационарных состояниях. Стационарные состояния в экономике – это способы производства (экономические уклады), отличающихся характером производственных отношений, связанных с отношениями собственности на средства производства. Так как уравнения (18)–(26), (28), (29) содержат члены, характеризующие прибавочную стоимость, то, следовательно, соответствующие им экономические уклады основаны на частной форме собственности. Уравнение (27) такого члена не содержит. А т. к. существует только две принципиально разных формы собственности (частная и общественная), то соответствующий этому уравнению уклад должен быть основан на общественной (социальной) собственности. Следовательно, этот уклад – социальная рыночная экономика, точнее рыночный социализм, а товарно-денежные отношения органически присущи социализму. Тогда шесть стационарных состояний – это азиатский, рабовладельческий, феодальный и буржуазный уклады, а также рыночный социализм и переходный от буржуазного к социалистическому обществу уклады. Соответственно, уравнение (18) описывает экономическую общественную формацию, уравнения (2), (21), (25) – существующую, а уравнение (27) – будущую экономику, к построению которой необходимо стремиться.

Аналогичные результаты можно получить, используя теорию химических сопряженных реакций, например, превращения продукта  $A$  в продукт  $B$  через промежуточный (активный) продукт  $X$ :



или



Ограничение процесса связывается как с обратимостью его стадий (наличием обратных реакций), так и с недостатком исходных продуктов  $(A - X)$ . Уравнение состояния для схем (31), (37) записывается в виде:

$$-k_2x^3 + k_1ax^2 - k_3x + k_4b = 0, \quad (38)$$

где  $a$  и  $b$  – концентрации веществ  $A$  и  $B$ ;  $k_1, k_2$  – константы скоростей прямой и обратной реакций для (31),  $k_3, k_4$  – для (37) соответственно.

Его можно переписать как

$$a_0 - a_1x + a_2x^2 - a_3x^3 = 0 \text{ или } (k_2 + \frac{k_3}{x^2} - \frac{k_4b}{x^3})x = k_1a, \quad (39)$$

т. е. в форме уравнений (2), (11), (15) (катастрофа «сборка»). Следовательно, переменная  $x$  в пространстве параметров  $k_1, k_2$  претерпевает фазовое расслоение: существуют два состояния устойчивого (фазы) и одно – неустойчивого (переходное) равновесия. Возможен смешанный процесс – одновременное протекание реакций (например, реакций (30)–(34), (37). При этом уравнение можно записать в форме уравнения (4):  $-a_6x^6 + a_5ax^5 - a_4x^4 + a_3x^3 - a_2x^2 + a_1x - a_0 = 0$ .

Если при анализе схем (31)–(37) в качестве активного промежуточного продукта  $X$  в химии можно рассматривать свободные радикалы, то в биологии – живые организмы (насекомые, животные и др.), а в социальных науках – население, капитал, производительные силы. Широким разнообразием нелинейных иерархически организованных систем отличается мир живого, начиная от полифункциональных макромолекул, состоящих из слабо связанных между собою субъединиц (например, гемоглобин), и кончая высшими организмами. В этих системах корреляция событий (структура) возникает как следствие кооперативного взаимодействия составляющих их элементов. Примером кооперативных процессов в биофизике являются переходы состояния  $T$  (напряженное) в состояние  $R$  (релаксированное) и наоборот субъединиц гемоглобина при адсорбции-десорбции кислорода (изменении парциального давления кислорода), а также субъединиц аквапоринов клеточной мембраны (при изменении разности осмотического давления). Эти процессы могут быть представлены схемами (30), (35) и описаны дифференциальным уравнением типа  $dx/dt = dx/dp = kx(1-x)$ , интегрирование которого дает  $S$ -образную кривую накопления продукта. Именно такой характер имеют экспериментальные кривые, как в первом, так и во втором случаях [7].

#### Литература

1. Егоренков, Н. И. Фазовая модель товарно-денежного хозяйства / Н. И. Егоренков, Е. Н. Казакова, М. Н. Стародубцева // Вопросы экономики. – 2005, № 8. – С. 41–47.
2. Базаров, И. П. Термодинамика / И. П. Базаров. – 4-е изд., перераб. и доп. – Москва : Высш. шк., 1991.
3. Викторов, И. В. Уравнения состояния для моделирования равновесий флюидных фаз в широком диапазоне условий / И. В. Викторов [и др.] // Журнал прикладной химии. – 1991. – Т. 64, № 5. – С. 961–977.
4. Румер, Ю. Б. Термодинамика, статистическая физика и кинетика / Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин. – Новосибирск : Сиб. ун-т, 2001.
5. Гилмор, Р. Прикладная теория катастроф: в 2 кн. ; пер. с англ. / Р. Гилмор ; кн. 1. – Москва : Мир, 1984.
6. Амелькин, В. В. Математические модели и дифференциальные уравнения / В. В. Амелькин, А. П. Садовский. – Минск : Высш. шк., 1982.
7. Hill, A. E., Shachar-Hill B., Shachar-Hill Y. What are aquaporins for? // J. Membrane Biol, 2004, V. 197, P. 1–32.