

Mittetasakaaluliste protsesside termodünaamika I

1. Mis on termodünaamiliselt tasakaalulised süsteemid?

Mis on termodünaamiliselt tasakaalulised protsessid?

Mis on termodünaamiliselt suletud ja avatud süsteemid?

Mis on, mida näitab entroopia (termodünaamiliselt suletud süsteemide korral)?

I liiki faasiüleminek – aine oleku muutus, mille korral muutub aine struktuur (ja tema omadused). Näiteks jää sulamisega muutub tema struktuur, muutub erisoojus, tihedus jne.

II liiki faasiülemineku korral muutuvad vaid aine omadused – erisoojus, eritakistus jne. Näiteks aine üleminek ülijuhtivasse faasi – struktuur jääb tavaliselt samaks, aine olek (tahke, vedel, gaasiline) ei muutu. Näiteks raual on magnetilised omadused. Ülalpool teatavat temperatuuri, nn Curie punkti, aga muutub raud mittemagnetiliseks aineks, st toimus II liiki faasiüleminek.

Kui aine aeglasel soojendamisel võime ligikaudu eeldada, et keha soojeneb kogu oma ruumala ulatuses ühtlaselt, st kõikjal on igal ajahetkel ligikaudu ühesugune temperatuur ja rõhk, st toimub ligikaudu tasakaaluline protsess. Aine oleku muutuse kirjeldamisel piisab meil keskmistatud suurustest, näiteks temperatuurist (mis iseloomustab aineosakeste keskmist kineetilist energiat) ning rõhust (mis iseloomustab osakeste keskmist kiirust ja kontsentratsiooni). Faasiüleminekute korral muutuvad oluliseks nende suuruste fluktuatsioonid – äkilised erinevused keskmisest suurusest. Näiteks aine kontsentratsioon võib mõnes tillukeses ruumi piirkonnas olla keskmisest kõrgem või madalam. Fluktuatsioonide olulise kohta järgmine näide.

Aine kristalliseerumisel sulamistemperatuuril (näiteks vee muutumine jääks) on teada, et mitte kogu ainekogum tervikuna ei tahkestu ühekorraga, vaid tekivad nn kristalliseerumistsentrid (temperatuur keskmisest õige pisut madalam), mille ümber hakkavad tekkima järjest suurenevad kristallid, mis lõpuks omavahel ühinevad kuni on moodustunud tervikkristall. Analoogiliselt ka näiteks vee aurustumise korral tekivad vee sees aurumullid (temperatuur õige pisut kõrgem keskmisest), mille ruumala hakkab kasvama, st selle sees tekib veeaur. Aurumullid kerkivad vedeliku pinnale ja lõhkevad.

Faasiüleminekutest võime rääkida ka kiiremate protsesside korral. Vee kuumutamisel on täheldatud järgmist fenomeni. Vee soojendamisel pliidiil tõusevad soojemad veekihiid veeanuma keskelt üles, ülal jahtuvad ja veeanuma seinu mööda vajuvad alla tagasi kandes niiviisi soojust alt üles, st hajutades energiat. Kui vett kiiremini soojendada (pliidi ja vee kohal oleva õhu temperatuuride erinevus on piisavalt suur) hakkavad tekkima veekeerised, mille suurus pole anuma suurus tervikuna, vaid väiksemad. Osutub, et soojuse hajutamine on niiviisi efektiivsem, st entroopia kasvab niiviisi kiiremini. Teisalt võime samuti rääkida faasiüleminekust – protsess on läinud energia aeglasema hajutamise faasist kiirema hajutamise faasi. Tuleb veel rõhutada ühte asjaolu – energia kiirema hajutamise korral on anumas tekkinud ruumiline struktuur. Vee ja väliskeskkona entroopia kasvab küll kiiremini, kuid vees on vahepeal entroopia mitte suurenenud, vaid vähenenud. Viimane on võimalik tänu sellele, et tegemist on termodünaamiliselt avatud ning mittetasakaalulise süsteemiga.

Mittetasakaaluliste protsesside uurimine on seotud teoreetilise mehaanikaga – kaose uurimisga. Kaose uurimine ja iseloomustamine sai alguse ilma uurimisest ja kirjeldamisest 1940.ndatel aastatel.

Kaos ei ole korratus!

Kuidas on seotud teoreetiline mehaanika, termodünaamika ja ökoloogia?

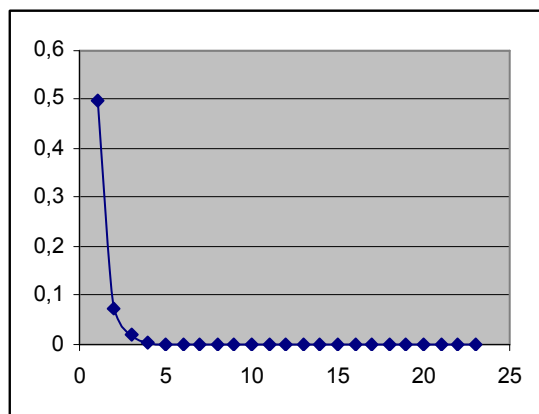
Teoreetilisest mehaanikast kasutatakse süsteemide kirjeldamiseks ja analüüsimiseks diferentsiaalvõrrandeid. Samamoodi kasutatakse populatsioonide ja nende vastastikmõjude uurimisel, ajalise arengu kirjeldamisel diferentsiaalvõrrandeid. Valdkonnad on küll täiesti erinevad, kuid matemaatiline keel on samasugune.

Edward Lorentz (matemaatik ja meteoroloog) analüüsis ilmastiku muutumist. See tugineb õhu ja vedelike konveksioonile (õhu vertikaalne liikumine ebaühtlase soojenemise tõttu). Henri Benard ja lord Rayleigh uurisid vee keeriste tekkimise teooriat 3 mittelineaarse diferentsiaalvõrrandi abil. Osutus, et algtingimuste väike muutmine võis viia täiesti teistsuguste tulemusteni. Matemaatilises mõttes on sellised diferentsiaalvõrrandite süsteemid ebastabiilsed. Kuivõrd ilmastiku uurimisel pole võimalik mõõta kõiki vajaminevaid suursi absoluutse täpsusega ning diferentsiaalvõrrandite lahendamisel tuleb kasutada arvutite abi, mis arvutavad samuti mingisuguse 'sammu' täpsusega, siis viivad ka need tulemused kaose tekkeni, ehk – me saame ilma arvutite abil ennustada vaid teatava täpsuseni (mõne päeva täpsusega).

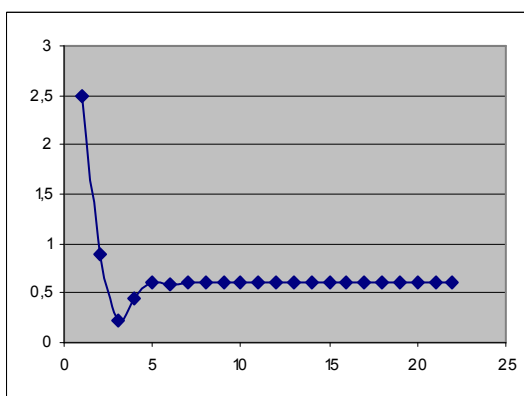
Kaos ja ökoloogia.

1845. a. võttis Verhulst populatsiooni arvukuse kirjeldamiseks abiks järgmise võrrandi:

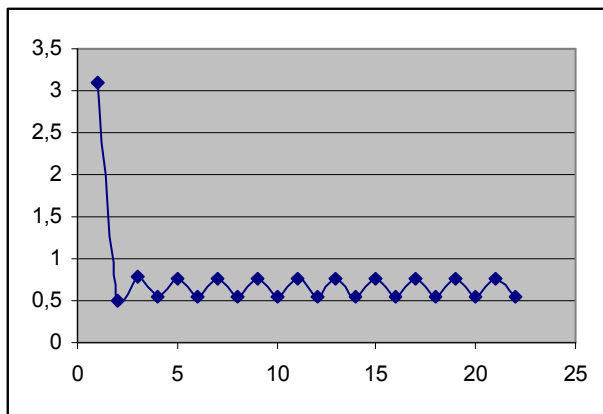
$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$, kus x_n – arvukust kirjeldav suurus ajahetkel t_n ; x_{n+1} – arvukust kirjeldav suurus järgmisel ajahetkel, r – sündivust (ja surevust) kirjeldav parameeter. (vt ka Merike Rosina diplomitöö). Kuivõrd võrrandi paremal poolel on sees ruut - x_n^2 , siis on tegemist mittelineaarse võrrandiga.



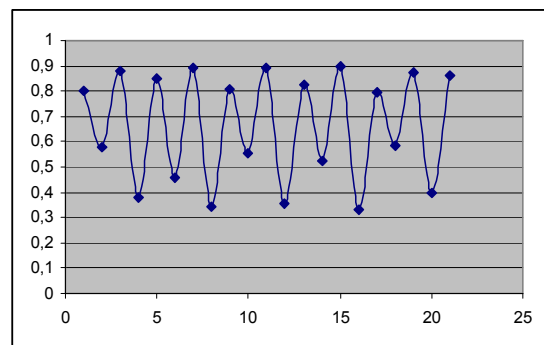
a



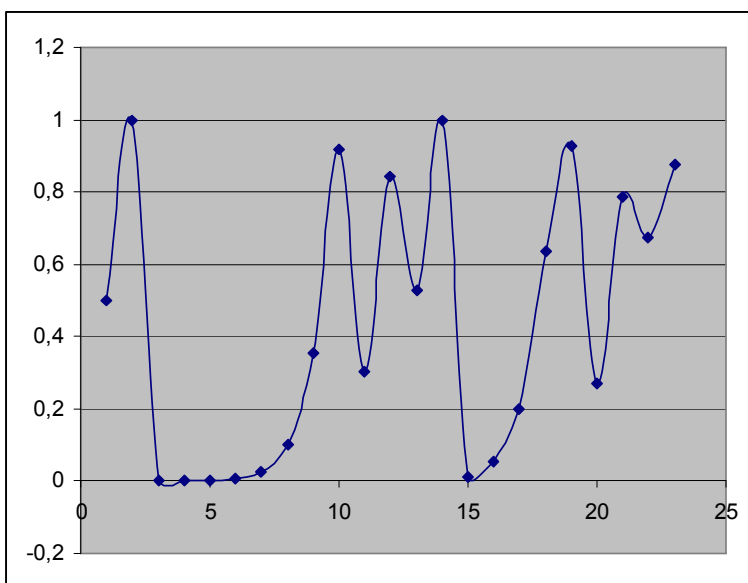
b



c



d



e

Joonis1. a) $r=0,3$; b) $r=2,5$; c) $r=3,1$; d) $r=3,6$; e) $r=3,999$.

Joonisel 1 on toodud Verhulsti poolt esitatud valemi käitumine erinevate r väärtuste korral. Kui $r < 1$, sureb populatsioon välja. Kui $3 < r < 3,5$, siis hakkab populatsiooni arvukust kirjeldav suurus pendeldama kahe väärtuse vahel, (0,6 ümber). Kui r on ületanud väärtuse 3,5, on võimalusi, mille vahel 'pendeldada' juba 4. r lähenemisel 4-le muutub süsteem kaootiliseks.

Matemaatikas räägitakse antud juhul perioodi kahendumisest ehk bifurkatsioonidest – alguses vaid üks võimalik väärtus, siis nn perioodi kahendumine – võimalikke väärtusi 2, siis veel üks bifurkatsioon – võimalikke väärtusi juba 4, ning edasi läheb süsteem kaootiliseks – pole võimalik ennustada tema käitumist.

Analoogiliselt võib bifurkatsiooni täheldada ka vedeliku voolamist jälgides. Näiteks vee voolamisel (jões, torus jm) toimub väikese voolukiiruse korral nn laminaarne ehk keerisevaba voolamine. Kui voolukiirus suureneb, tekivad keerised (turbulents), kusjuures kõik keerised on ligikaudu samasuguse läbimõõduga. Voolukiiruse edasisel suurenemisel mingist hetkest hakkavad esineva kahe erineva läbimõõduga keerised. Juhul kui voolukiirus kasvab veelgi, muutub olukord kaootiliseks – on paljude erinevate suurustega veekeeriseid.

Seega võime öelda, et energia juurdeandmisel tekkis süsteemis mingi struktuur. Energiavoo edasisel suurendamisel muutus struktuur keerukamaks. Kui energiavoog läbi süsteemi läks veel suuremaks, tekkis kaos.

Veekraan ja kaos (perioodi kahendumine). Kui veekraan on pisut lahti, tilguvad sealt tilgad kindla perioodi järel, näiteks 130 ms, kui veekraani veel pisut avada, hakkavad tilgad tulema 95-150-95-150-95-... ms järel (perioodi kahendumine), selline perioodi kahendumine on võimalik veel korra, edasi hakkavad tilgad tilkuma kaootiliselt.

Veel näiteid. Sõrmede liigutamine. Meditsiinis südame rütmid ja arütmia. Moskiitode unerütmi uurimine.

Kokkuvõttes võib öelda järgmist – sõltuvalt süsteemi läbiva energi hulgast võib süsteemil leiduda nii korrastatud kui ka korrastamata olekuid.

Entroopia, energia kvaliteet.

Süsteemi läbiva energia hulga suurendamine võib süsteemi viia ühest olekust teise (toimub faasiüleminek). Vastupidine alati ei kehti. Eelmises alapunktis toodud näidete põhjal võib öelda, et süsteemi läbiva energiavoo läbimisel võivad tekkida struktuurid (Benari rakud vee soojendamisel, mingi suuruse perioodiline muutumine - ajaline struktuur!). Võib küsida – kui suur peab olema energiavoog, et selline uus struktuur hakkaks tekkima? Kas leiduvad mingid kvalitatiivsed seosed, mille abil võib struktuuride teket iseloomustada?

Tuletame meelde termodünaamika seadused.

Termodünaamika I seadus (energia jäävuse seadus): kui ainehulk on jääv, siis süsteemi siseenergia muutus on võrdne süsteemile antud soojushulga ja süsteemi poolt tehtud töö vahega ($\Delta U = \Delta Q - A$, kus ΔU - siseenergia muutus, ΔQ - süsteemile antud soojushulk, A – süsteemi poolt tehtud töö).

Termodünaamika I seadus näitab, et soojusprotsessides peab kehtima energia jäävus.

Termodünaamika II seadus (entroopia kasvu seadus): soojuslikult isoleeritud süsteemis ei saa süsteemi entroopia muut olla negatiivne ($\Delta s \geq 0$).

Entroopia muutus võib olla null vaid pööratava protsessi korral, mittepööratavate protsesside korral on süsteemi entroopia muutus positiivne.

Termodünaamika II seadus määrab ära protsessi suuna – kõik soojusprotsessid peavad olema sellised, et entroopia suureneks või jääks samaks.

TD II teisi sõnastusi: soojus ei saa iseenesest minna külmemalt kehalt soojemale.

Ei ole võimalik ehitada perioodiliselt töötavat soojusmasinat, mille tegevuse ainus tulemus on soojuse muutumine tööks.

Ülaltoodud seadused on algselt defineeritud soojuslikult isoleeritud süsteemide jaoks. Näiteks soojuslikult avatud süsteemis võib entroopia väheneda, samas väliskeskkonnas peab see siis suurenema.

Entroopia – korratuse mõõt.

Entroopia saab defineerida nii olekufunktsioonina, mis on esitatud temperatuuri kaudu kui ka statistilise või tõenäosusega seotud suurusena. Viimast võib kirjeldada järgmiselt. Olgu meil kast, milles on 10 kuuli. Jagame kasti 10 võrdseks osaks. Raputame pidevalt seda kasti. Kui heidame mingil hetkel kasti pilgu, siis kõige väiksem tõenäosus on leida kõik need kuulid ühest ja samast osast – sellele vastab suurim võimalik kord (ja vähim entroopia). Kõige suurem on tõenäosus, et kõik kuulid paiknevad eri osades, sellele vastab vähim kord ja kõige suurem entroopia. Kui algselt kuulid ka olid ühes ja samas kasti osas, siis raputamise protsessi käigus võtab süsteem sellise oleku, et entroopia oleks suurim.

Analoogiline näide – laseme veeklaasi tinditilga. Algselt on tinditilk ühes kohas koos – süsteemi iseloomustab suur kord, ajapikku hajub tint ühtlaselt üle veeklaasi laiali – korratus on suurenenud ja entroopia on saavutanud oa maksimumi. Seega näitab entroopia suurenemine antud protsessi loomulikku suunda.

Entroopia – energia kvaliteedi mõõt.

Käsitledes protsesse, mille käigus energia muutub ühest liigist teise, võime panna paika protsesside iseenesliku suuna. Vaatame näites bioloogilist süsteemi.

Valgusenergia assimileerimine → *keemiline energia* (nt suhkur) → *helienergia* (*mehaaniline energia*) → *elektrienergia* → *valgusenergia* → *soojusenergia*.

See skeem näitab ka entroopia suurenemist süsteemis (keskkonnas). Ühtlasi võime rääkida energia kvaliteedi kahanemisest. (Mida suurem energia kvaliteet, seda väiksem on entroopia ses süsteemis). Bioloogiline süsteem (taim) assimileerib kõrgekvaliteedilist valgusenergiat (ultraviolettkiirgus), mis muutub keemiliseks energiaks. Selle keemilise energia arvelt võib bioloogiline süsteem teha tööd – muundab keemilise energia mehaaniliseks (loomad jooksevad jne). Samuti võime selle muundada elektrienergiaks või valgusenergiaks (põletamine). Lõpuks on tulemuseks soojusenergia. Mida madalam on aine temperatuur, seda raskem on seda muundada kasulikuks tööks. Soojuskiirgus on madalaima kvaliteediga energia.

Süsteem mehaanikas – maapinnast 10 m kõrgusel oleval pallil on maapinna suhtes potentsiaalne energia (mehaaniline energia). Kui pall kukub alla, muutub see kineetiliseks (ikka veel mehaaniline energia). Pärast mitmeid üles-alla hüplemisi ja pörkeid maapinnaga jääb pall maapinnale – iga pörkega läheb osa mehaanilisest energiast palli ja maapinna molekulide soojusliikumiseks ehk soojusenergiaks kuni viimaks on kogu kineetiline energia muundunud soojusenergiaks. Süsteemi pall-maapind entroopia on suurenenud. Kuigi kokkuvõttes on sel süsteemil sama energia, on selle kvaliteet madalam. Pall ei tõuse iseeneslikult algsele tasemele.

Iseorganiseeruvus. Süsteemid, struktuurid. Eksergia.

Keerulised süsteemid nagu elusorganismid, sotsiaalsed süsteemid, ökoloogilised süsteemid on iseorganiseeruvad – nad suudavad automaatselt end korrastada ja muuta vastavalt väliskeskkonna muutustele. Sellistele süsteemidele on iseloomulik mitmete keerukate ruumiliste ja ajaliste struktuuride olemasolu. (rakustruktuurid, kliima perioodilised muutused jne). Iseorganiseeruvus põhineb pideval tagasisidel – süsteem peab saama informatsiooni sellest, kas tema muutus vastab väliskeskkonna muutusele, kas see on 'õige'.

Ökosüsteemide ja elusorganismide dünaamika põhineb nn negatiivsel ja positiivsel tagasisidel. See eeldab lineaarseid põhjuslikke seoseid (väliskeskkonna väike muutus viib organismi mingi parameetri väikesele muutusele). Sellise tagasiside juurde kuuluvad ka oht ja üllatused. Üldiselt ei pruugi väliskeskkonna väike muutus viia kohe süsteemi muutusele. Võib öelda, et süsteem on tasakaaluolekus (atraktor) ja väliskeskkonna väikese muutuse korral üritab püsida selle oleku juures. Kui väliskeskkonna muutus ületab mingi kindla piiri, läheb süsteem hüppeliselt teise kvaasitasakaalulisse olekusse (atraktorisse). Näiteks – temperatuuri langemisel alla teatava piiri heidavad loomad talveunne (elutegevuse protsessid aeglustuvad). Selle kohta öeldakse ka – üleminek ühest olekust on katastroofiline. Tegelikult pole ka tagasiside kunagi lineaarne, on seda vaid teatavas lähenduses - kui väliskeskkond pole muutunud palju, võib organism arvestada lineaarse tagasisidega. Hüppelised muutused on iseloomulikud just mittelineaarsele tagasisidele.

(Termodünaamiliselt) avatud süsteeme nim dissipatiivseteks süsteemideks – nad hajutavad energiat. Juhul, kui energiavoog läbi süsteemi kasvab, hakkab süsteem kasutama seda iseorganiseeruvuseks – mingi struktuuri tekkeks. Selle struktuuri korral võib süsteem endast suurema energiavoo läbi lasta ja samas, süsteemist väljuva energia kvaliteet on madalam.

Millal on energeetiliselt avatud süsteem stabiilne (vähemalt mõne aja vältel)?

Prigogine – energeetiliselt ja aineliselt avatud süsteemid suudavad teatavaks ajaperioodiks leida tasakaaluasendist kaugel asuva asendi, see on lokaalse tasakaalu asend.

Näiteks laserid, tornaadod, elusorganismi rakud püsivad mõne aja muutumatuna. Kuigi puudub termodünaamiline tasakaal keskkonnaga, süsteemi läbib suur eksergiavoog, on süsteem lokaalses tasakaaluasendis tänu sellele kõrgele eksergiavoole.

Kehtib üldine termodünaamiline printsiip: Kui süsteemid liiguvad tasakaaluasendist eemale, siis panevad nad sellele liikumisele vastu; kui süsteem on juba tasakaaluasendist eemale nihutatud, tõrgub ta tagasi minemast.

Energia kvaliteedi hinnanguks (kui palju tööd võib energia teha) kasutatakse mõistet **eksergia**: eksergia näitab antud energiahulga poolt tehtavat kasulikku tööd, kui süsteem läheb oma keskkonnaga tasakaaluasendisse.

Makroskoopilise termodünaamilise protsessi käigus läheb energia kvaliteet (mehaanilist) tööd tehes kaduma. Öeldakse ka, et eksergia mõõdab süsteemi ja keskkonna vahelist 'kaugust'. Süsteem, mis saab väljastpoolt eksergiat, eemaldub oma tasakaaluasendist. Süsteemi vastureaktsioon on selline, et süsteemis tekivad struktuurid, süsteem organiseerub selliselt, et oleks võimalik eksergia maksimaalne alandamine antud tingimustes. St, süsteem üritab end ümber kujundada (iseorganiseeruvus!) selliselt, et süsteemist väljuv eksergia oleks minimaalne.

Dissipatiivsed süsteemid kui eksergia degradeerijad.

Prigogine jt on näidanud, et iseorganiseeruvatel süsteemidel on dissipatiivsed struktuurid tekkinud läbi fluktuatsioonide ja ebastabiilsuste. Skeem: Stabiilne olek → (suur energiavoog) → fluktuatsioonid → bifurkatsioonid → uus stabiilne olek.

Uute struktuuride tekke juures on oluline mittelineaarse tagasiside olemasolu (mittelineaarsed seosed).

Elusorganismid on äärmiselt mittetasakaalulised dissipatiivsed süsteemid. Kogu planeet Maa kui tervik on samuti mittetasakaaluline dissipatiivne (energiat hajutav, väliskeskkonna entroopiat suurendav) süsteem. Planeedi Maa terviku seisukohalt võib vaadata süsteemi selliselt. Maale siseneb kõrgekvaliteediline valgus- ja ultraviolettkiirgus. Maalt väljub madalakvaliteediline (suure entroopiaga) soojuskiirgus. Maad ümbritseva keskkonna entroopia suureneb, Maa entroopia väheneb. Siin kujunevad uued struktuurid tänu eksergia alandamisele.

Dissipatiivseid süsteeme iseloomustavad järgmised näitajad:

- avatud aine ja energia vood;
- süsteem on mittetasakaaluline, kuid selles leiuvad kvaasitasakaalulised olekud;
- süsteemid on üles ehitatud eksergia abil, mis on suunatud läbi avatud piiride;
- tsüklilised ja perioodilised protsessid (ajas ja ruumis);
- süsteeme iseloomustab kaootiline ja katastroofiline käitumine – süsteemi pikale ja stabiilsele arengule võivad järgneda äkilised hüpped ja süsteemi areng, sellised hüpped on etteennustamatud;
- mida kaugemale on süsteem liikunud tasakaaluasendist, seda rohkem peab ta energiat kasutama; seda keerukam on süsteemi struktuur
- uue lokaalse tasakaaluasendi poole liigub süsteem hüppeliselt.

Elu teke. Bioloogiliste süsteemide areng.

Elu teke on võimalik ilmselt väga kõrgete eksergiavoogude korral, st süsteemi tuleb sisse kõrgekvaliteediline energia (ultraviolettkiirgus) ja on võimalik väga madalatasemelise energia väljumine.

Bioloogiline kasv toimub juhul, kui süsteem lisab juurde palju teid, mida mööda eksergiat degradeerida. Mida suurem süsteem, seda rohkem on teid ja võimalusi. Ühe liigi erinevad alampopulatsioonid võivad valida erinevad teed eksergia degradeerimiseks, see vastab vastava alampopulatsiooni keskkonnale. Nii tekivad võimalused uute liikide tekkeks ja arenguks, eluks, kohandamiseks paremini sobivad liigid jäävad ellu.

Näited. Eksergia degradeerimine erinevates süsteemides.

Olgu tegemist tavalise peegliga. Peegel peegeldab tagasi peaaegu samasuguse kiirguse, mis talle saabub, energia kvaliteet peaaegu ei muutu. Roheline laud peegeldab ja kiirgab valgust peamiselt vaid rohelises spektriosas (ülejäänud osas neelab), kiirguse temperatuur on madalam kui lauale langeva kiirguse temperatuur. Roheline muru kiirgab ja peegeldab samamoodi nagu roheline laudki vaid rohelist valgust (pluss natuke soojuskiirgust), kuid temperatuur muru kohal on tunduvalt madalam kui murule langeva kiirguse temperatuur. Liigirikka vihmametsa kohal on temperatuur veelgi madalam. Seega, mida keerukama süsteemiga on tegemist, seda rohkem see eksergiat degradeerib. Vihmametsa korral viib süsteemi keerukamaks veel suur liigirikkus ja liikide vahel valitsevad keerulised seosed.

Keeruliste süsteemide omadused:

- mittelineaarsed – süsteemid käituvad kui tervik, pole võimalik süsteemi lõhkuda tükkideks säilitades seejuures süsteemile iseloomulikud omadused;
- hierarhilised – üks süsteem võib koosneda paljudest alamsüsteemidest, mis koosnevad omakorda alamsüsteemidest jne.;

- sisemine põhjuslikkus – see pole mitte mehaaniline põhjuslikkus, vaid iseorganiseeruv, sisemine tagasiside ja kontroll (kas reaktsioon väliskeskkonnale on õige, kas see säilitab süsteemi tervikna);
- leidub elujõulisuse aken – leiduvad kindlad piirid, mille korral süsteemi areng, elu on optimaalne. Elusorganismide korral on äiteks maksimaalne ja minimaalne temperatuur, mille puhul suudavad veel elada, kuid leidub optimaalne temperatuur, mille puhul kasv või areng on kiireim. Samamoodi – õhurõhu piirid; õhus oleva hapniku hulk; kättesaadava toidu hulk;
- leidub palju võimalikke atraktoreid – palju võimalikke kvaasistasakaalulisi olekuid, mille poole püüelda;
- katastroofiline käitumine;
- kaootiline käitumine.

Termodünaamika 4. seadus.

Kui süsteemi läbib eksergia voog, siis kasutab süsteem eksergiat selleks, et liikuda termodünaamilise tasakaalu asendist kaugemale. Kui süsteemil on rohkem kui üks tee tasakaaluasendist eemaldumiseks, valitakse tee, mis degradeerib eksergiat kõige enam ja läheb kõige kaugemale.

Mittetasakaaluline termodünaamika 2

Termodünaamika II seadus ja entroopia statistiline tähendus.

Olgu meil tegemist süsteemiga, mis koosneb viiest alamsüsteemist. Olgu igal alamsüsteemil võimalikud 4 energiaolekut: $E_1, E_2=2 E_1; E_3=3 E_1; E_4= 4 E_1$. Tähistame n_i – energiatasemel E_i olevate alamsüsteemide arv. Kui me valiksime välja suvalise alamsüsteemi, siis tõenäosus,

et selle energia oleks E_i on $f_i = \frac{n_i}{N}$, kus N on alamsüsteemide koguarv. Antud juhul $N=5$.

Kehtib $\sum_i f_i = 1$ (kõiginäosuste summa on 1). Olgu U alamsüsteemi siseenergia, siis

keskmine alamsüsteemide keskmine energia on leitav järgmiselt: $\bar{E} = U = \sum_i f_i E_i$. Süsteemi

koguenergia on alamsüsteemide energiatega summa: $E_{kogu} = \sum_i E_i$. Üldiselt leidub väga palju

võimalusi, et süsteemi koguenergia oleks mingi fikseeritud suurus E_{kogu} . Iga sellise võimaluse võime ette anda kogumina $\{n_1, n_2 \dots\}$. (Antud konkreetsel juhul $\{n_1, n_2, n_3, n_4\}$). Ühe sellise võimaluse statistiline kaal on arvutatav järgmiselt:

$$W = \frac{N!}{n_1! n_2! n_3! \dots}.$$

Olgu meil nüüd $N=5$ ja süsteemi koguenergia $E=10E_1$. Üks võimalus sellise süsteemi saamiseks on see, kui kõigil alamsüsteemidel on energia E_2 , st $n_1=0, n_2=5, n_3=0, n_4=0$. Selle oleku statistiline kaal:

$$W = \frac{5!}{0!5!0!0!} = 1.$$

Olgu realisatsioon järgmine: $n_1=1, n_2=3, n_3=1, n_4=0$. Siis

$$W = \frac{5!}{1!3!1!} = 20.$$

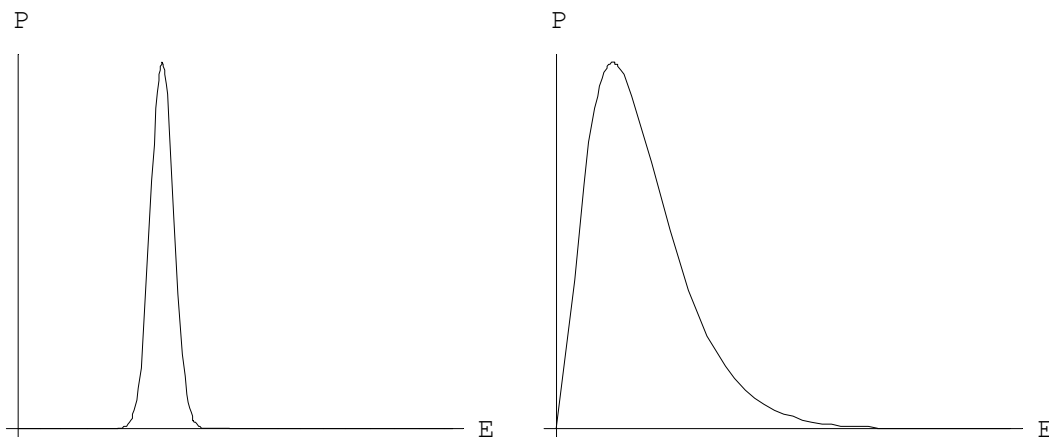
Veel üks realisatsioon: $n_1=1, n_2=1, n_3=1, n_4=1$.

$$W = \frac{5!}{1!1!1!1!} = 120.$$

Statistilises füüsikas on leitud, et süsteemi entroopia s on arvutatav järgmiselt:

$$s = -k \sum_i f_i \ln f_i = k \ln W, \text{ kus } k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K on Boltzmanni konstant.}$$

Entroopia valemist rakendades on kerge leida, et süsteemi entroopia on suurim viimasel juhul ja vähim siis, kui kõigil alamsüsteemidel on ühesugune energia.



Joonis 1. Alamsüsteemide energiatega tõenäosused.

Joonisel 1 on E alamsüsteemi energia, P – tõenäosus, et alamsüsteem oleks vastava energiaga olekus. Statistilises füüsikas küsitatakse väga paljude osakeste süsteeme (gaasimolekulid näiteks). Esimene joonis vastab juhule, kui kõigil osakestel on peaaegu ühesugune kineetiline energia (võrdle ülalt juhtumiga $W=1$). Selline juhtum on väga ebatõenäoline. Termodünaamilise tasakaalu olekus realiseerub teine juhtum, mil osakeste energiad on jaotunud väga suurde vahemikku, kusjuures tõenäolisema energia juures on rohkem osakesi kui täiesti paigalseisvaid (kineetiline energia on null) või väga suure kiirusega liikuvaid osakesi.

Termodünaamika II seadus ütleb, et kui süsteem on algul olekus, kus tema entroopia on väike, siis liigub ta termodünaamilise tasakaaluolekusse, kus entroopia s on maksimaalne.

Entroopia ja informatsioon.

Shannon uuris kommunikatsiooniprobleeme (1946a.) ja seda, kuidas informatsioon võib selle edastamise käigus kaotsi minna, st uuris peamiselt informatsiooni edastamise täpsust (mitte semantilisest poolt). Shannoni informatsiooni defineerimiseks vaatame järgmist näidet.

Raamatus on tähti (a,b, c, ...) koguarvuga N . Olgu n_1 – tähtede 'a' koguarv raamatus, n_2 - tähtede 'b' koguarv jne. Tõenäosus i nda tähe leidmiseks:

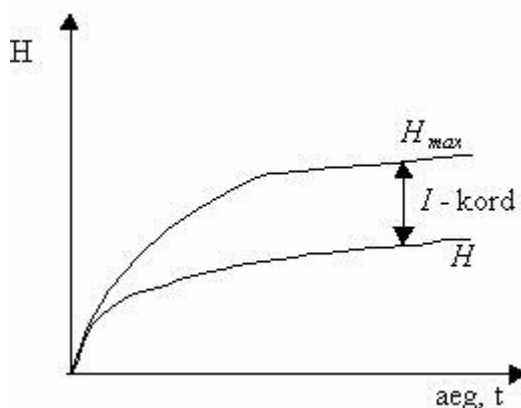
$p_i = \frac{n_i}{N}$. Shannoni informatsioon – ühe tähe kohta tulev keskmine informatsioon:

$H = -\sum_i p_i \log_2 p_i$. H on vähim (0), kui kõik tähed on ühesugused (kas 'a'-d, 'b'-d, 'c'-d jne). H on suurim, kui nii 'a'-sid, 'b'-sid jne on ühepalju. Seega, kui H on minimaalne, kannavad kõik tähed 0-informatsiooni; kui H on maksimaalne, on ühe sümboli poolt kantav informatsioon kõigi sümbolite jaoks võrdne. Shannoni informatsiooni definitsioon on väliselt sarnane entroopia definitsiooniga.

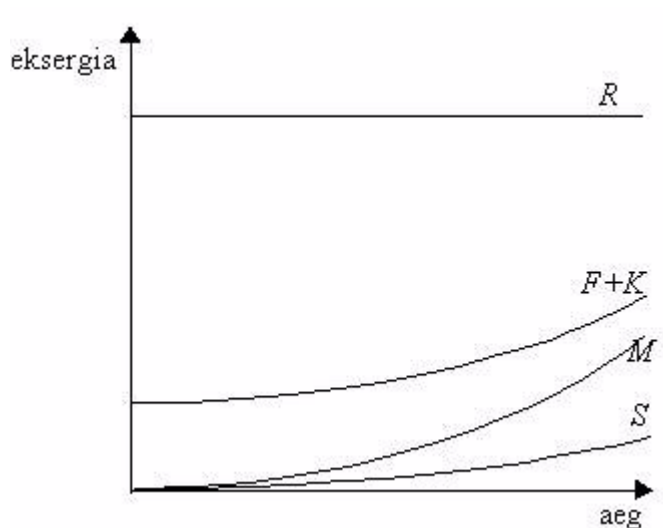
Nii entroopia s termodünaamikas kui ka informatsioon H kasvavad võimalike mikroolekute kasvades. Shannoni informatsiooni kasutatakse ka ökoloogias liikide mitmekesisuse mõõduna (vt. allpool).

Tähistame $H_{\max}$ - antud süsteemi entroopia, kui ta oleks tasakaalulises olekus (maksimaalne entroopia), H – mittetasakaalulises olekus oleva süsteemi entroopia. Siis ühe käsitluse kohaselt võib kirjutada

$I = H_{\max} - H = Ne$, kus I on informatsioon (mitte Shannoni informatsioon!) ehk süsteemis valitseva korra mõõt. Ne – Schrödingeri negentroopia (entroopia vastand, samuti – korra mõõt). Olgu meil tegemist termodünaamiliselt avatud süsteemiga, siis aja jooksul süsteemis kord kasvab (tekivad struktuurid), seda kujutab järgmine joonis.



Järgneva joonise peal on kirjeldatud, kuidas Maa või üks osa Maast kasutab eksergiat. R – Maalt peegelduv eksergia (ajas enam-vähem konstantne); $F+K$ – füüsikalistes ja keemilistes protsessides kasutatav eksergia, läheb uute füüsikaliste struktuuride tekkeks (ka näiteks tormid), keerukamate molekulide tekkeks; M – bioloogilise süsteemi käigushoidmiseks kuluv eksergia; S struktuuri ülesehitamiseks kuluv eksergia.



Veel mõned märkused eksergia, entroopia ja keemiliste-bioloogiliste süsteemide kohta.

Tingimused, et korratusest tekitada korda (keerukate keemiliste molekulide ja struktuuride teke):

1. Süsteem peab olema energeetiliselt avatud – võimalik energiavahetus keskkonnaga.
2. Tarvilikuks ja piisavaks tingimuseks on eksergia (kasutamiskõlbliku energia) voog.
3. Kõrge entroopiaga energia väljumine (mida madalam energia, seda parem, siiski – temperatuur peab olema üle 2,7 K (Universumi taustkiirguse temperatuur).
4. Korra saavutamiseks peab kaasnema entroopia tootmine süsteemi ümbritsevas keskkonnas.
5. Peavad olema kõrge tasemega massitranspordi protsessid (mida kiiremini suur hulk energiat süsteemist läbi läheb, seda parem. Kuid kõige rohkem läheb süsteemist energiat läbi koos ainega).

Ökoloogiliste süsteemide korral keerukad süsteemid:

- üle 20 elemendi;
- kõrge temperatuur (kõrgem väliskeskkonna temperatuurist);
- fotosünteesi nõudvate protsesside olemasolul peab leiduma valgust;
- võime kasutada kombineeritud resursse;
- olulised on algtingimused süsteemi arenguks – igast lähteasendist ei pruugi areneda elujõulist kooslust;
- võimalikud aja ja ruumi tingimuste variatsioonid.

Ökosüsteemide stabiilsus

Intuiitiivselt võiks öelda, et bioloogilised, keemilised, ökoloogilised süsteemid, mis on piisavalt kaua eksisteerinud, on oma tasakaaluasendi lähedal, st iga väliskeskkonna muutus ei vii neid selle asendi juurest kaugele – väikese häirituse lõppemisel läheb süsteem tasakaaluasendisse tagasi. Seega, meie jälgime vaid stabiilseid ökosüsteeme, mis on adapteerinud ja kohandunud väliskeskkonnaga. (Siiski küsimus – mida mõista ebamääraste terminite 'küllalt pikk aeg' ja 'häiritus' all).

Ökoloogide käsitle kohaselt on ökosüsteemi stabiilsuse mõõduks liikide küllus (diversity).

Kooslus on stabiilne, kui liikide arv jääb piisavalt pika aja (aeg on ilmselt pikem kõige pikema elueaga liigi mitme põlvkonna 'eaust') vältel konstantseks.

Termodünaamilise tasakaalu mõistega sobib paremini kokku järgmine 'definitsioon' – kooslus või populatsioon on stabiilne, kui selle komponendid ei tee järske fluktuatsioone (alampopulatsiooni arvukus ei suurene hüppeliselt, isas- ja emasloomade arvukuse vahetõrge ei tee järske hüppeid jne).. See tähendab, et tasakaaluasendist kaugemale eemale viivad fluktuatsioonid on ebatõenäolised.

Olgu meil tegemist n liigiga. Olgu N_i – i -nda liigi populatsiooni suurus (arvukus), N – kõikide liikide kogusuurus (isendite koguarv). Siis

$p_i = \frac{N_i}{N}$ - i -nda liigi esindaja leidmise tõenäosus (tõenäosus, et kui valime suvalise looma, on see parajasti näiteks kass). Liikide mitmekesisuse mõõt ehk informatsiooni mitmekesisuse indeks:

$$D = -\sum_{i=1}^n p_i \ln p_i$$
. Valem on sarnane informatsiooni või entroopia valemile ja võiks oodata, et

ka ökoloogias, kui D on maksimaalne, on kooslus tasakaalus. Tegelikult see nii ei ole. Mõned sarnasused siiski on:

D suureneb, kui süsteem läheneb stabiilsele olekule.

D on suurem, kui liikide arv n on suurem, mida rohkem liike, seda stabiilsem kooslus.

Kuid D on maksimaalne parasjagu siis, kui kõikides liikides võrdne arv isendeid. Bioloogiast, ökoloogiast on teada, et see ei ole nii.

Miks D ei kajasta 'õigesti' süsteemi stabiilsust ja tasakaalu? Üks põhjusi – ökoloogilised süsteemid on tihti hierarhilised, tugevas vastastikmõjus (erinevalt termodünaamilistest süsteemidest).

Mis või kuidas määrab stabiilsust? Matemaatiliselt? Teoreetilises mehaanikas on suhteliselt kaua (võrreldes ökoloogiaga) tegeldud süsteemi tasakaalu uurimisega. Põhilised matemaatilised meetodid ongi sellest valdkonnast pärit.

Olgu meil tegemist n liigiga, iga liigi arvukus on N_i . Süsteemi olekut (liikide arvukust) määravad võrrandid

$$\frac{dN_i}{dt} = F_i(N_1, N_2, \dots, N_n), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad N_i \geq 0.$$

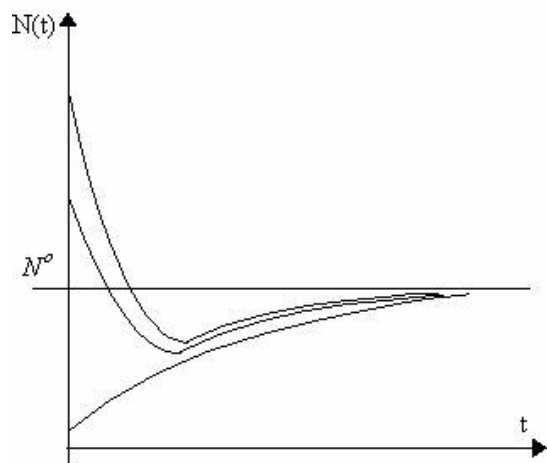
(Siin on koos n võrrandist koosnev võrrandisüsteem). Tähistame kogumi $\vec{N} = (N_1, N_2, \dots, N_n)$. Algttingimused siis (liikide arvukus alghetkel $t=t_0$): $\vec{N}(t_0) = \vec{N}_0$.

Definitsioon: Võrrandisüsteemi $\frac{dN_i}{dt} = F_i(N_1, N_2, \dots, N_n)$ lahend $\vec{N}^*$ on lokaalselt stabiilne

Ljapunovi mõttes, kui iga $\varepsilon > 0$ korral leidub $\delta > 0$, nii et kui $\|\vec{N}_0 - \vec{N}^*\| < \delta$ järeldub, et

$\|\vec{N}(t, \vec{N}_0) - \vec{N}^*\| < \varepsilon$ iga $t > t_0$ korral, kus $\vec{N}(t, \vec{N}_0)$ tähistab algolekule $\vec{N}_0$ vastavat olekut $\vec{N}$. Kui lisaks sellele $\vec{N}(t) \rightarrow \vec{N}_0$, siis on olek asümptootiliselt stabiilne Ljapunovi mõttes.

Lahtiseletatuna – olgu meil algolek $\vec{N}_0$. Sellele vastab mingi kindel lahend $\vec{N}(t)$. Oletame, et meil on tegemist teise algolekuga $\vec{N}^*$, mis erineb olekust $\vec{N}_0$ õige vähe. Siis see olek $\vec{N}^*$ on stabiilne juhul, kui ka selle lahend $\vec{N}^*(t)$ erineb lahendist $\vec{N}(t)$ õige vähe. Algoleku väikesed häiritused tähendavad väikesi häiritusi ka süsteemi edasises arengus. Vastupidine eelmisele oleks süsteemi kaootiline käitumine – juhtum, kus väikesed häiritused algolekus viivad suurte erinevusteni süsteemi lõppolekus või isegi süsteemi ettearvamatule käitumisele. Asümptootiline stabiilsus tähendab, et kõik häiritud olekud lähevad aja jooksul ühte kohta kokku (vt alljärgnev joonis):

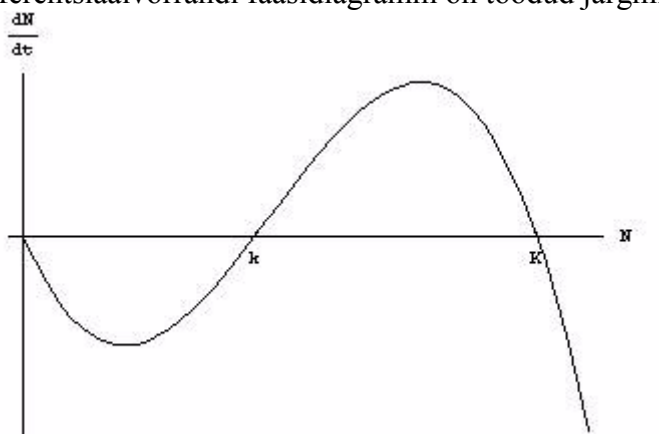


Joonisel on näha, kuidas erinevad trajektoolid koonduvad ühte kohta kokku, st tegemist on asümptootilise stabiilsusega.

Ökoloogilise süsteemi stabiilsuse öeldakse – ükski trajektoor ei lähe lõpmatusse ega nulli, st trajektoor (arvukus) võib kõikuda kahe erineva raja (maksimum ja miinimum) vahel ja nii kõikide liikide jaoks. Iga liigi jaoks maksimum ja miinimum erinevad.

Matemaatilises mõttes on tegemist veel täielikult lahendamata probleemiga. Lihtsamate süsteemide korral on võimalik ka diferentsiaalvõrrandist välja lugeda piirkondi, mille korral on süsteem stabiilne ja mille korral mitte. Selle näitena vaatame juhtumit, kui tegemist vaid ühe liigiga, mille populatsiooni arvukuse muutumist aja jooksul (arvukuse kasvamise kiirus) kirjeldab järgmine seos:

$$\frac{dN}{dt} = N \left(1 - \frac{N}{K} \right) (N - k),$$
 kus K ja k on mingisugused konstandid.. Eeldame, et $k < K$. Antud diferentsiaalvõrrandi faasidiagramm on toodud järgmisel joonisel:



Analüüsisides võrrandit, leiame, et juhul kui $N=0$, siis on populatsiooni kasvukiirus $dN/dt=0$. Analoogiliselt $dN/dt=0$, kui $N=k$ ja $N=K$. Kui $N<k$, siis on kasvukiirus negatiivne, st populatsiooni arvukus väheneb (joonisel graafik allpool nulli) kuni saavutab oma miinimumi, st $N=0$ ehk – populatsioon sureb välja. Kui $k<N<K$, siis on võrrandi paremal poolel kõik liikmed positiivsed, seega on kasvukiirus positiivne – populatsiooni arvukus suureneb kuni saavutab taseme $N=K$, siis on kasvukiirus taas võrdne nulliga ning tegemist stabiilse olukorraga. Kui $N>K$, siis on kasvukiirus negatiivne ning populatsiooni arvukus kahaneb kuni jõuab tasemeni $N=K$. Seega – piirkond $N>k$ on stabiilne piirkond. Ükskõik, milline poleks populatsiooni arvukus antud juhul, saavutab ta lõpuks stabiilse taseme $N=K$.