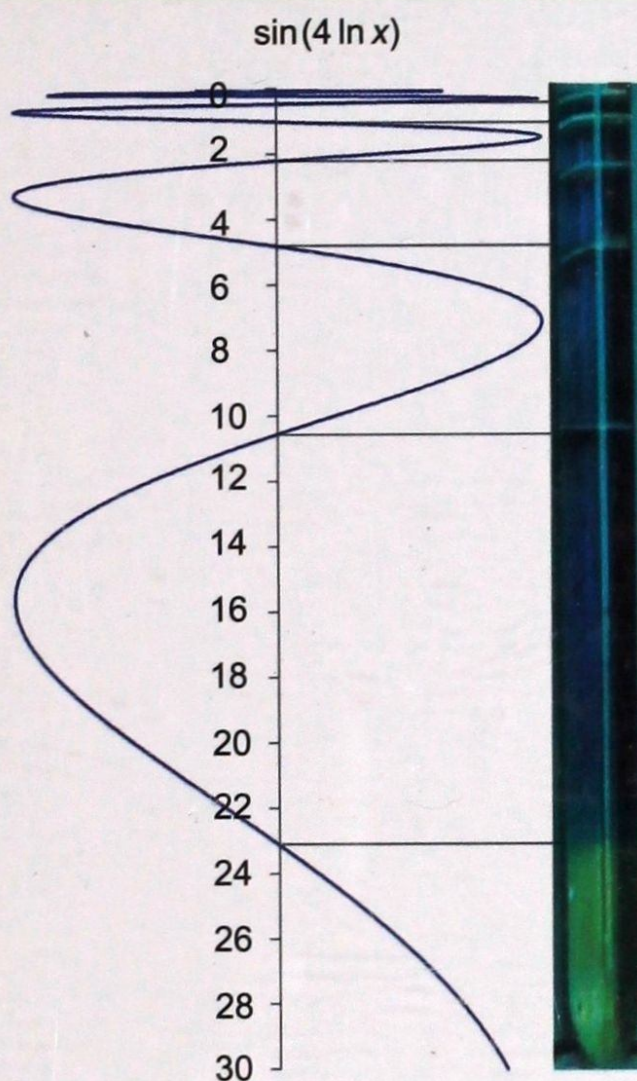


Б-211828

# ДИСКРЕТНОСТЬ И НЕПРЕРЫВНОСТЬ В СВОЙСТВАХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ



Б-24828

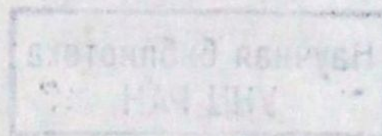
# ДИСКРЕТНОСТЬ И НЕПРЕРЫВНОСТЬ В СВОЙСТВАХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Под общей редакцией

В.И. Кузьмина, Д.Л. Тытика, А.Ф. Гадзаова



МОСКВА  
ФИЗМАТЛИТ®  
2014



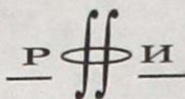
541.124 + 541.12

УДК 501:544:51-7:541.182:

542.87:544.022.4

ББК 24.5:24.54:24.57

Д 48



Издание осуществлено при поддержке  
Российского фонда фундаментальных  
исследований по проекту 13-03-07021,  
не подлежит продаже

Авторский коллектив:

Кузьмин В.И., Тытик Д.Л., Гадзаов А.Ф., Абатуров М.А.,  
Белашенко Д.К., Бусев С.А., Касаткин В.Э., Смолин А.В.,  
Цетлин В.В.

**Дискретность и непрерывность в свойствах физико-химических систем** / Под общей ред. В.И. Кузьмина, Д.Л. Тытика, А.Ф. Гадзаова. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. — 176 с. + 16 с. цв. вклейка. — ISBN 978-5-9221-1569-8.

В книге изложены методы моделирования стадий физико-химических процессов на основе прецизионных измерений их кинетических параметров. Рассматриваемые процессы включают в себя быстро и медленно меняющиеся компоненты, причем соотношение характерных времен для них может отличаться на несколько порядков. Это приводит к необходимости разделения процессов на микро- и макроуровнях с помощью специальных методов обработки данных. Для процессов на макроуровнях рассмотрены методы определения границ стадий (критических точек, точек фазовых переходов). Для анализа колебаний параметров физико-химических процессов введен класс сдвиговых функций, позволяющий находить систему почти-периодов, которые характеризуют свойства системы и соответствуют разным уровням ее организации. Эффективность предложенного подхода иллюстрируется обработкой данных о характеристиках ряда классических физико-химических процессов, полученных современными экспериментальными и теоретическими методами (кольца Лизеганга, окисление спиртов, кластеры серебра и др.).

Книга предназначена исследователям естественно-научного профиля, аспирантам и студентам, специалистам в области разработки информационных систем, а также ученым гуманитарного направления, оперирующим большими статистическими выборками.

Б-211828-11К

Научная библиотека  
УНЦ РАН

ISBN 978-5-9221-1569-8

© ФИЗМАТЛИТ, 2014

© Коллектив авторов, 2014

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>Введение</b> .....                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 5   |
| <b>Глава 1. Методы определения критических точек, разделяющих непрерывные стадии физико-химических процессов</b> .....                                                                                                                                                                                             | 15  |
| 1.1. Модели кинетики .....                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 15  |
| 1.1.1. Экспоненциальные тренды (16). 1.1.2. Степенные функции как модели трендов (19). 1.1.3. Модели интенсивного роста (23). 1.1.4. Модели ограниченного роста (27). 1.1.5. Методы разделения быстрых и медленных движений (33).                                                                                  |     |
| 1.2. Особые точки .....                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 39  |
| 1.2.1. Особые точки Д. И. Менделеева (39). 1.2.2. Охлаждение воды (42). 1.2.3. Зависимость динамической вязкости воды от температуры (51).                                                                                                                                                                         |     |
| 1.3. Кинетика образования колец Лизеганга .....                                                                                                                                                                                                                                                                    | 55  |
| 1.3.1. Экспериментальная часть (56). 1.3.2. Закономерность движения фронта диффузии аммиака и кинетика процесса образования колец Лизеганга (60). 1.3.3. Диффузионная модель процесса образования колец Лизеганга (66). 1.3.4. Кинетика изменения размеров наночастиц на границе раствора аммиака и желатина (73). |     |
| <b>Глава 2. Почти-периоды в характеристиках физико-химических систем</b> .....                                                                                                                                                                                                                                     | 78  |
| 2.1. Модели и алгоритмы определения почти-периодов .....                                                                                                                                                                                                                                                           | 78  |
| 2.2. Анализ шумовых сигналов .....                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 91  |
| <b>Глава 3. Разделение медленных и быстрых движений и общий анализ периодических процессов</b> .....                                                                                                                                                                                                               | 98  |
| 3.1. Алгоритм определения трендовых составляющих в эмпирических данных .....                                                                                                                                                                                                                                       | 98  |
| 3.2. Структура и динамические свойства кластеров серебра ..                                                                                                                                                                                                                                                        | 103 |
| 3.2.1. Дискретные модели строения наночастиц. Симплициально-модульный дизайн (105). 3.2.2. Строение иерархического 471-атомного кластера, полученного методом                                                                                                                                                      |     |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| симплициально-модульного дизайна (106). 3.2.3. Строе-<br>ние и динамика кластеров серебра с магическими числами<br>атомов (107). 3.2.4. Модель погруженного атома (110).<br>3.2.5. Идентификации структурных превращений на ос-<br>нове корреляции угловых величин симплексов разби-<br>ения Делоне кластера (111). 3.2.6. Результаты модельных<br>экспериментов с магическими кластерами серебра (114).<br>3.2.7. Разделение быстрых и медленных движений атомов<br>в 147-атомном кластере серебра (121). |     |
| 3.3. Почти-периодические колебания напряжения на электро-<br>дах электрохимических ячеек с деионизованной водой. . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 125 |
| 3.4. Критические точки и периодические компоненты процесса<br>окисления нормальных алифатических спиртов с адсор-<br>бированным кислородом на гладком поликристаллическом<br>платиновом электроде. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 130 |
| 3.5. Выявление периодов в динамике радиационных условий<br>и гелио-геофизических факторов в области орбиты стан-<br>ции «Мир» . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 147 |
| <b>Заключение</b> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 155 |
| <b>Список литературы</b> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 158 |
| <b>Приложение</b> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 166 |
| <b>Сведения об авторах</b> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 175 |

Научное издание

КУЗЬМИН Виктор Иванович      ТЫТИК Дмитрий Леонидович  
ГАДЗАОВ Алексей Федорович      АБАТУРОВ Михаил Анатольевич  
БЕЛАЩЕНКО Давид Кириллович      БУСЕВ Сергей Алексеевич  
КАСАТКИН Вадим Эдуардович      СМОЛИН Александр Владимирович  
ЦЕТЛИН Владимир Владимирович

**ДИСКРЕТНОСТЬ И НЕПРЕРЫВНОСТЬ В СВОЙСТВАХ  
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Редактор *И.В. Авилова*  
Оригинал-макет: *Д.П. Вакуленко*  
Оформление переплета: *Н.Л. Лисицына*

Подписано в печать 26.12.2013. Формат 60×90/16. Бумага офсетная.  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 11 + 1 усл. печ. л. цв. вклейка.  
Уч.-изд. л. 12,1 + 1,1 уч.-изд. л. цв. вклейка. Тираж 250 экз.  
Заказ №1286.

Издательская фирма «Физико-математическая литература»  
МАИК «Наука/Интерпериодика»  
117342, Москва, ул. Бултерова, 17 Б  
E-mail: [fizmat@maik.ru](mailto:fizmat@maik.ru), [fmlsale@maik.ru](mailto:fmlsale@maik.ru);  
<http://www.fml.ru>

Отпечатано с электронных носителей издательства  
в ГУП МО «Коломенская типография».  
140400, г. Коломна, ул. III Интернационала, д. 2а.  
ИНН 5022013940. Тел.: 8(496)618-69-33, 618-60-16.  
E-mail: [bab40@yandex.ru](mailto:bab40@yandex.ru), [www.kolomna-print.ru](http://www.kolomna-print.ru)