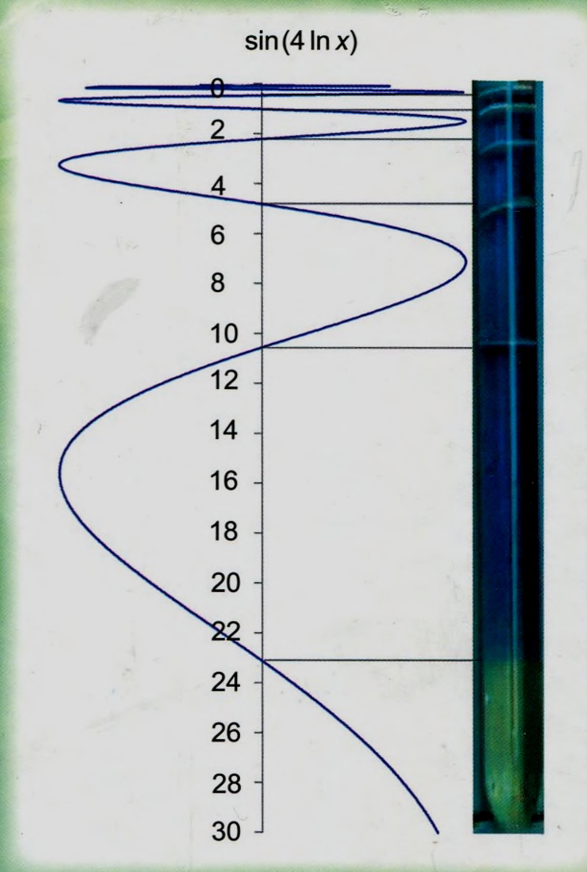


544
Д48

ДИСКРЕТНОСТЬ И НЕПРЕРЫВНОСТЬ В СВОЙСТВАХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ



ДИСКРЕТНОСТЬ И НЕПРЕРЫВНОСТЬ В СВОЙСТВАХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Под общей редакцией
В. И. Кузьмина, Д. Л. Тытика, А. Ф. Гадзаова



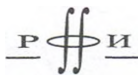
МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2014

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, окислени 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.

ISBN 978-5-9221-1569-8

© ФИЗМАТЛИТ. 2014

© Коллектив авторов, 2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Глава 1. Методы определения критических точек, разделяющих непрерывные стадии физико-химических процессов	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).	
Глава 2. Почти-периоды в характеристиках физико-химических систем	78
2.1. Модели и алгоритмы определения почти-периодов.....	78
2.2. Анализ шумовых сигналов.....	91
Глава 3. Разделение медленных и быстрых движений и общий анализ периодических процессов	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. Структура и динамика кластеров серебра с магическими числами атомов (107). 3.2.4. Модель погруженного атома (110). 3.2.5. Идентификации структурных превращений на основе корреляции угловых величин симплексов разбиения Делоне кластера (111). 3.2.6. Результаты модельных экспериментов с магическими кластерами серебра (114). 3.2.7. Разделение быстрых и медленных движений атомов в 147-атомном кластере серебра (121).	
3.3. Почти-периодические колебания напряжения на электродах электрохимических ячеек с деионизованной водой.	125
3.4. Критические точки и периодические компоненты процесса окисления нормальных алифатических спиртов с адсорбированным кислородом на гладком поликристаллическом платиновом электроде.....	130
3.5. Выявление периодов в динамике радиационных условий и гелио-геофизических факторов в области орбиты станции «Мир».....	147
Заключение.....	155
Список литературы.....	158
Приложение.....	166
Сведения об авторах.....	175