

1) **Сосредоточенные и распределенные системы, пассивные и активные среды. Определения и примеры.**

Распределённая система — система, для которой отношения местоположений элементов (или групп элементов) играют существенную роль с точки зрения функционирования системы, а, следовательно, и с точки зрения анализа и синтеза системы.

Примерами распределенных систем могут служить:

- Сеть газопроводов
- Электросети
- Интернет

Сосредоточенной системой является система, альтернативная распределенной системе. Так бывает, когда существуют системы, решающие одинаковые задачи, системы, функционально эквивалентные, но конструктивно различные. Обозначим две такие системы S_d и S_{sa} . Множество элементов каждой из систем можно разделить на подмножества: S_d разделим на U_d и W_d , а S_{sa} на U_{sa} и W_{sa} . Множества, обозначенные буквой U , состоят из сосредоточенных элементов, занимающих относительно небольшой объем пространства и реализующих некоторую функцию преобразования. Множества, обозначенные буквой W , состоят из элементов, связывающих некоторые сосредоточенные элементы между собой. Их основная задача не преобразование, а передача чего-либо в системе от одного элемента к другому. Например, сосредоточенными элементами могут быть два компьютера, осуществляющих вычисления по некоторым алгоритмам. Связывающим элементом может быть кабель, один конец которого подсоединен к первому компьютеру, а второй конец – ко второму компьютеру.

Элементы из множества W_d могут быть весьма разнообразными, с большим количеством характеристик. Напротив, в сосредоточенных системах элементы из множества W_{sa} описываются просто, а часто вообще исключаются из рассмотрения как несущественные для анализа свойств системы. Множества сосредоточенных элементов U_{sa} и U_d сосредоточенной и распределенной систем также могут отличаться. В сосредоточенной системе функционирование элементов из U_{sa} инвариантно их местоположению. В распределенной системе функционирование элементов из U_d в общем случае зависит от их местоположения.

Активными(пассивными) называются те системы, которые **(не) затрачивают** энергию на свои действия. как активные, так и пассивные системы потребляют энергию. Однако **пассивные потребляют внешнюю энергию**, приносимую самим внешним воздействием, а **активные – свою собственную внутреннюю энергию**. Примерами активных систем в биологии являются миоциты, нейроны, секреторные клетки и все прочие системы, потребляющие в качестве энергии АТФ. Примерами пассивных систем являются аорта и вообще все артериальные сосудистые сети, запасавшие энергию ударного выброса во время систолы желудочков путём растяжения их упруго-эластических стенок. Пассивной системой является также грудная клетка, которая осуществляет пассивный выдох, и многие другие системы живого организма.

2) Соотношения взаимности Онзагера (общие уравнения, условия применимости, примеры). Принцип минимума производства энтропии Пригожина (для каких систем/условий).

В термодинамике необратимых процессов Ларс Онзагер сформулировал следующее положение: при небольших отклонениях от равновесия термодинамический поток можно представить в виде линейной комбинации термодинамических движущих сил:

$$J_i = L_{i1}X_1 + L_{i2}X_2 + L_{i3}X_3 + \dots + L_{ii}X_i + \dots + L_{iN}X_N,$$

Где X_i – движущая сила, сопряженная с потоком J_i она определяет прямой эффект. X_j (не равно i), движущие силы, сопряженные с другими потоками, они характеризуют перекрестные эффекты по отношению к процессу i . Коэффициенты L называют **феноменологическими коэффициентами** (пр. вязкость, теплопроводность, коэффициенты диффузии и термодиффузии).

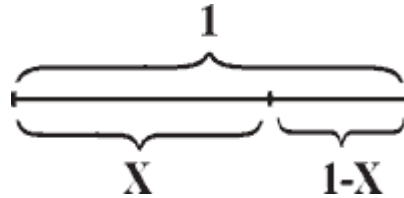
Данное соотношение для систем, близких к равновесию, называется соотношением взаимности Онзагера.

Принцип минимума производства энергии, или теорема Пригожина, – теорема, утверждающая, что стационарному состоянию линейной неравновесной системы (в условиях, препятствующих достижению равновесного состояния) соответствует минимальное производство энтропии. Если таких препятствий нет, то производство энтропии достигает своего абсолютного минимума — нуля. То есть, в области применимости соотношений Онзагера (в линейной области) система с наложенными на неё граничными условиями (открытая система) эволюционирует к стационарному состоянию, характеризующемуся минимальным производством энтропии.

Суть теоремы Пригожина заключается в том, что стационарное состояние, к которому необратимо стремится линейная термодинамическая система, должно отличаться тем, что в нём перенос энтропии в окружающую среду настолько мал, насколько это позволяют наложенные на систему граничные условия. В этом смысле равновесное состояние соответствует тому частному случаю, когда граничные условия допускают бесконечно малое производство энтропии. Иначе говоря, теорема о минимуме производства энтропии отражает своеобразную инерцию системы: если граничные условия мешают системе достичь состояния термодинамического равновесия, она стремится к состоянию, настолько близкому к состоянию равновесия, насколько это ей позволяют обстоятельства, т.е. обмен веществом и энергией с окружающей средой.

3) Как и почему распространены пентагональные структуры в неживой и живой природе?

Для ответа на данный вопрос необходимо ввести понятие золотого сечения. Золотое сечение (золотая пропорция) - это закон пропорциональной связи целого и составляющих его частей. Классический пример золотого сечения – задача о делении отрезка в крайнем и среднем отношении, когда целое относится к большей своей части, как большая часть к меньшей:



Решение этой задачи сводится к уравнению $X^2 + X - 1 = 0$

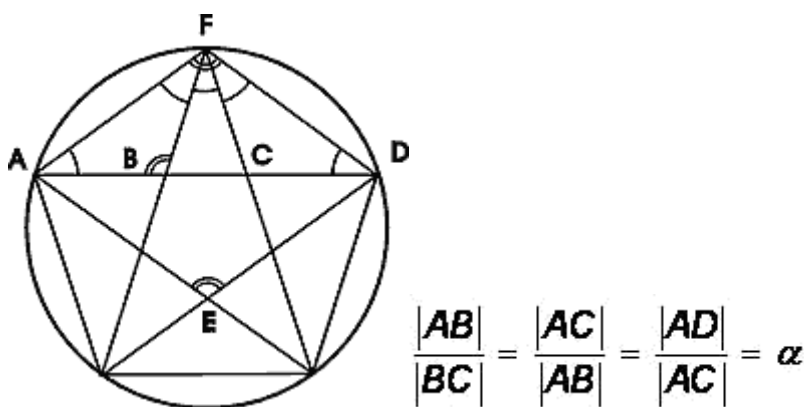
Одно из решений которого $\frac{-1 + \sqrt{5}}{2} = 0.6180339\dots$, а его обратная величина

$a = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1.6180339\dots$ – основание золотой пропорции.

Число a является единственным числом, кроме нуля, удовлетворяющим рекуррентному соотношению:

$$a^{n+2} = a^{n+1} + a^n$$

Если рассмотреть правильный пятиугольник, то увидим, что он буквально "заполнен" золотым сечением, так:



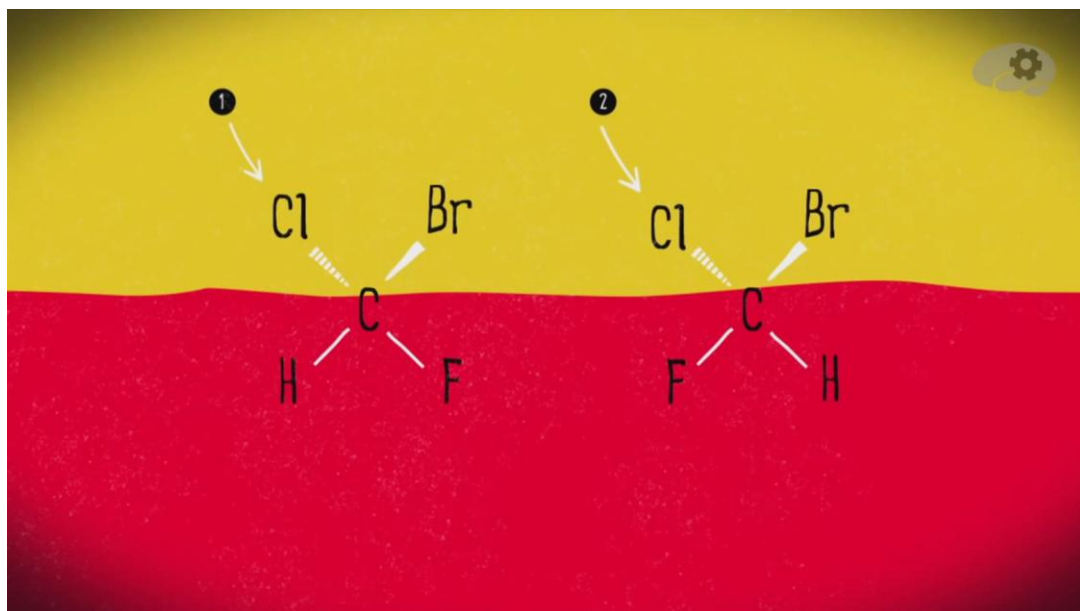
Углы ABF, AFD и AED равны 108° или $\frac{3}{5}\pi$, а углы ADF, AFB, BFC равны 36° или $\frac{1}{5}\pi$, при этом:

$$\cos\left(\frac{\pi}{5}\right) = \frac{1}{2}\alpha; \quad \cos\left(\frac{3}{5}\pi\right) = -\cos\left(\frac{2}{5}\pi\right) = -\frac{1}{2\alpha}$$

Пентагональная симметрия встречается только в живой природе и является отличительной чертой саморегулирующихся систем. Тогда как в кристаллах – «неживых структурах», согласно классической кристаллографии, возможны симметрии третьего, четвертого и шестого порядков [39]. В отличие от классических кристаллов, квазикристаллы 5-го порядка, открытые Дэном Шехтманом являются "пограничными" объектами на стыке "живого" и "неживого". Чем глубже мы будем понимать разницу между "живым" и "неживым", тем больше мы будем находить "пограничных" объектов. Из всех правильных фигур только пятиугольником нельзя заполнить плоскость. Нужно отметить, что в поперечном сечении двойная спираль ДНК - правильный пятиугольник.

4) Определение хиральности. Принцип построения хиральных иерархий в молекулярно-биологических системах. Парадокс Левинталя.

То, что молекулы состоят из атомов, соединенных химическими связями, ученым было известно еще на заре органической химии, о трехмерной структуре молекул не было известно ничего, поскольку средств для ее определения не существовало. Для изображения молекул использовались простые структурные формулы, и в середине 19 века ведущие химики осознали, что для описания ряда наблюдаемых явлений подобные формулы не годятся. Но удовлетворительной трехмерной модели теоретическая химия на тот момент не могла предложить. В 1874 году Вант Гофф предложил принципиально новую гипотезу, согласно которой четыре связи в молекуле метана образуют тетраэдр. Теория ждала теоретического подтверждения более 25 лет. Вант Гофф в своих построениях отталкивался от оптических свойств веществ, он заметил, что те вещества, в которых центральный атом углерода связан с 4 различными заместителями вращают плоскость поляризации света. Было ясно, что все данные вещества объединяет какая-то особенность:



Сравните эти две молекулы, в каждой из них атом углерода соединен с 4мя другими атомами, если исходить исключительно из состава молекул, то логично сделать вывод, что обе молекулы абсолютно идентичны, но наложить друг на друга эти две молекулы, чтобы получить 100% совпадение невозможно.

Теперь посмотрите на свои руки,



обе они одинаковы в том плане, что у них есть пальцы, следующие друг за другом в одинаковом порядке, и состоят они из тех же мышц и костей. Однако абсолютно одинаковыми они не являются, как и молекулы.

Левая рука ведет себя как зеркальное отражение правой, иначе говоря, руки-зеркальное отражение друг друга. То же самое верно в отношении молекул.

И руки, и молекулы обладают свойством хиральности, или предпочтительным направлением вращения. Хиральный объект – тот, что отличается от своего отражения в зеркале. Свойством хиральности обладают шурупы, одни бывают правозаходными, другие – левозаходными. Аналогично этим шурупам может вести себя и свет: линейный пучок плоско поляризованного света образован право- и левозакрученными электромагнитными волнами, совместное вращение которых дает плоскую поляризацию. Если на пути пучка плоско поляризованного света поместить хиральные молекулы, они будут гасить одну из этих волн, закручивая плоскость поляризации света в определенном направлении. Вант Гофф и его последователи поняли, что явление поворота плоскости поляризации объясняется хиральной природой тетраидальных органических молекул.

<http://vmu.phys.msu.ru/file/2008/3/08-3-03.pdf> –здесь хранится ответ на вторую часть вопроса.

Парадóкс Левинтáля — известный парадокс, который сформулировал в 1968 году Сайрус Левинталь: «промежуток времени, за который полипептид приходит к своему скрученному состоянию, на много порядков меньше, чем если бы полипептид просто перебирал все возможные конфигурации».

Чтобы разрешить данный парадокс, необходимо ответить на вопрос: «Как белок выбирает свою нативную структуру (nativestate) среди бесчисленного множества возможных?». Для цепи из 100 остатков число возможных конформаций $\sim 10^{100}$, и их полный перебор занял бы $\sim 10^{80}$ лет, если один переход осуществлять за $\sim 10^{-13}$ секунды. Поэтому сложность проблемы заключается в том, что данный вопрос нельзя решить экспериментально, так как придётся ждать $\sim 10^{80}$ лет.

Назывались следующие возможные причины этого парадокса^[3].

- Теоретические модели, используемые для доказательства твёрдости, не соответствуют тому, что **природа** старается оптимизировать.
- В ходе **эволюции** были отобраны только те белки, которые легко **сворачиваются**.
- Белки могут сворачиваться разными путями, не обязательно следуя глобально оптимальному пути.

Решение парадокса

Белок может сворачиваться не «весь вдруг», а путем роста компактной глобулы за счёт последовательного прилипания к ней все новых и новых звеньев белковой цепи^[2]. При

этом одно за другим восстанавливаются финальные взаимодействия (их энергия E будет падать примерно пропорционально количеству звеньев цепи), а энтропия S падать также пропорционально количеству фиксированных звеньев цепи. Падение энергии и падение энтропии полностью компенсируют друг друга в главном (линейном по N) члене в свободной энергии $\Delta F = \Delta E - T\Delta S$. Это исключает из оценки времени сворачивания член, пропорциональный 10^N , и время сворачивания зависит от много меньших по порядку величины нелинейных членов, связанных с поверхностными энтальпийными и энтропийными эффектами, пропорциональными $N^{2/3}$ ^[21]. Для белка из 100 остатков это $10^{100 \cdot 2/3} \sim 10^{21,5}$, что дает оценку скорости сворачивания, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными.

5) Гипотеза о происхождении предшественников клеток в Мировом океане.

Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо обратиться к идеям 30-70-летней давности.

Опубликованная в 1924 г. книга А.И. Опарина «Возникновение жизни на Земле» стимулировала интерес ученых к проблемам происхождения жизни и абиогенного синтеза. Успешными были серии экспериментов, проведенные в начале 1950-х гг. С. Л. Миллером, в которых при коронном электрическом разряде в смеси газов NH_3 , H_2 , CH_4 и насыщенного водяного пара (имитировавшей древнюю атмосферу), продолжавшихся несколько дней, образовывались аминокислоты и некоторые другие органические соединения, характерные для современных организмов. Эти эксперименты были затем многократно и успешно повторены в разных лабораториях. При вариациях химического состава смеси (добавлении HCN , формальдегида, H_2S и т. д.) и за счет электрического разряда на ультрафиолет или тепловое воздействие удалось получить не только аминокислоты, но и некоторые нуклеиновые основания, порфирины, сахара, компоненты липидов. К настоящему времени практически все основные биологически важные органические соединения бы ли получены в лабораторных экспериментах, моделирующих условия, существовавшие около 4 млрд лет назад в различных местах на Земле.

Это приводит нас к рассуждениям о разумности теории Опарина-Миллера.

Опарин предположил, что в растворах высокомолекулярных соединений могут образовываться зоны высокой концентрации, которые отделены от внешней среды и могут поддерживать с ней обмен. Он назвал их коацерватными каплями.

Согласно его теории жизнь на Земле возникла в результате процесса, который можно разделить на три этапа:

- Возникновение органических веществ
- Возникновение белков
- Возникновение белковых тел

Подробнее можно узнать в статье Твердислова

<http://vmu.phys.msu.ru/file/2008/3/08-3-03.pdf>