



Plus ratio quam vis

**ZŁOŻONOŚĆ, PRZYPADEK,
SAMOORGANIZACJA:**

***Paradygmaty ewolucji naukowo-kulturalnej
w pracach Ilyi Prigogine'a***

Ewa Gudowska-Nowak

*Instytut Fizyki im. M. Smoluchowskiego i Centrum Badania Układów Złożonych
im. M. Kaca, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie*

Studium Generale Universitatis Wratislaviensis, 28.02.2012

„Nasza wizja przyrody ulega gruntownej zmianie ewoluując ku **wielości, czasowości i złożoności...**

Zasada wzrostu entropii opisuje świat jako układ przechodzący stopniowo do chaosu. Tymczasem ewolucja systemów biologicznych czy społecznych dowodzi, że to, co złożone wyłania się z tego, co proste...

Brak równowagi, którego wyrazem jest przepływ materii i energii, może być **źródłem porządku...**”

I. Prigogine, I. Stengers „Z chaosu ku porządkowi: Nowy dialog człowieka z przyrodą”, PIW, 1990

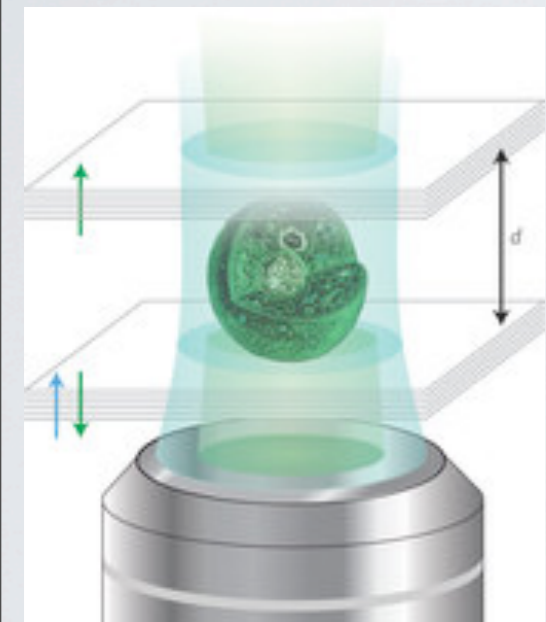
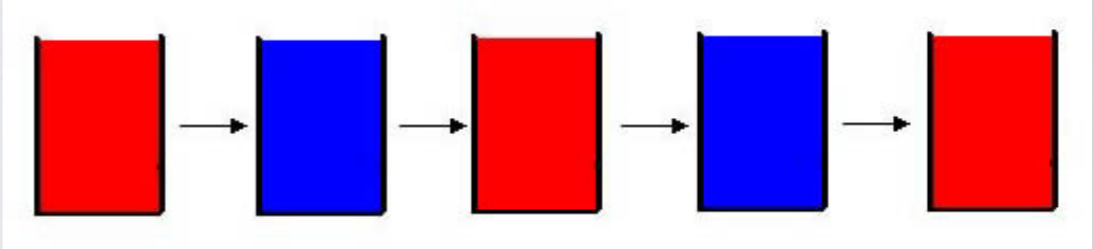
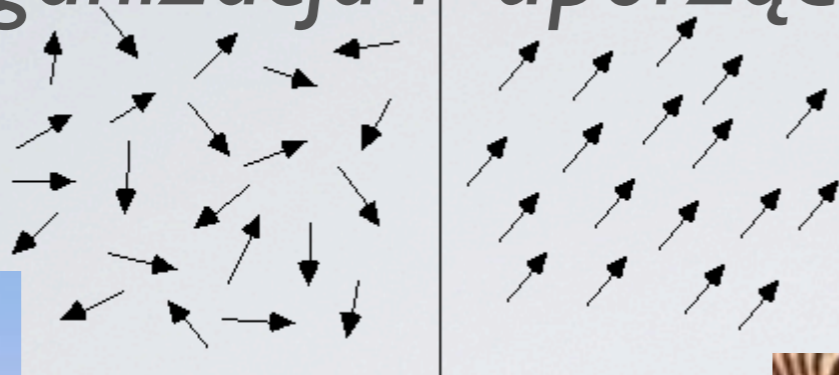


Ilya Prigogine 1917-2003
Nagroda Nobla 1977

Tworzenie jest podstawową cechą Wszechświata, a kreatywność naukowa równoległa do kreatywności artystycznej ...

(z wywiadu z E. Lévy, Le Point, 18.01, 2002)

Samorganizacja i uporządkowanie



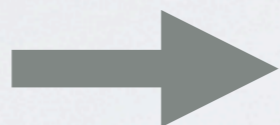
- *Samorganizacja* jest spontanicznym procesem tworzenia się uporządkowanych struktur przestrzennych i czasowych
- *Układy samoorganizujące się są emergentne* (całość posiada własności odmienne od własności układów składowych)

Układy złożone: narzędzia opisu

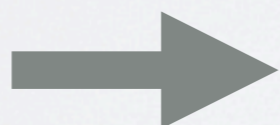
teoria układów dynamicznych,



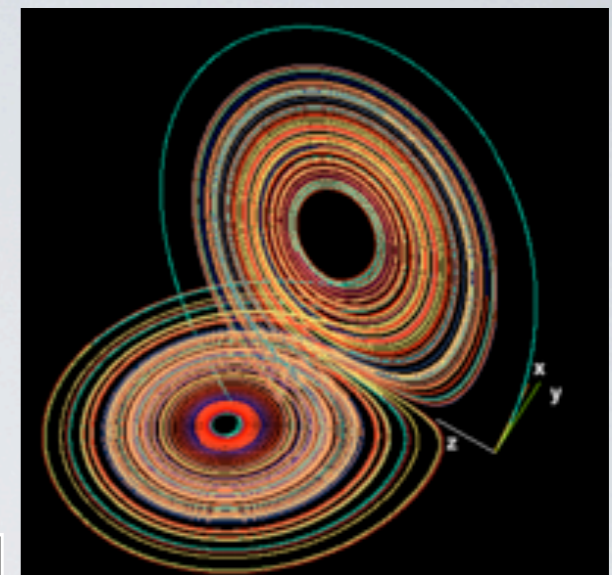
procesy stochastyczne,



termodynamika nierównowagowa

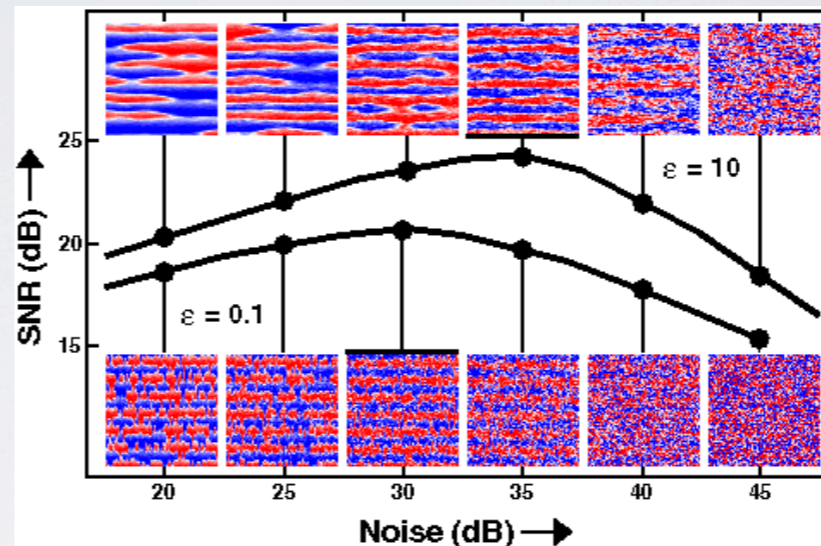


$$\begin{aligned}\dot{X} &= \sigma(Y - X) \\ \dot{Y} &= -XZ + rX - Y \\ \dot{Z} &= XY - bZ\end{aligned}$$



projekt Wolfram/Mathematica

A. Bulsara, Physics Today, 1993

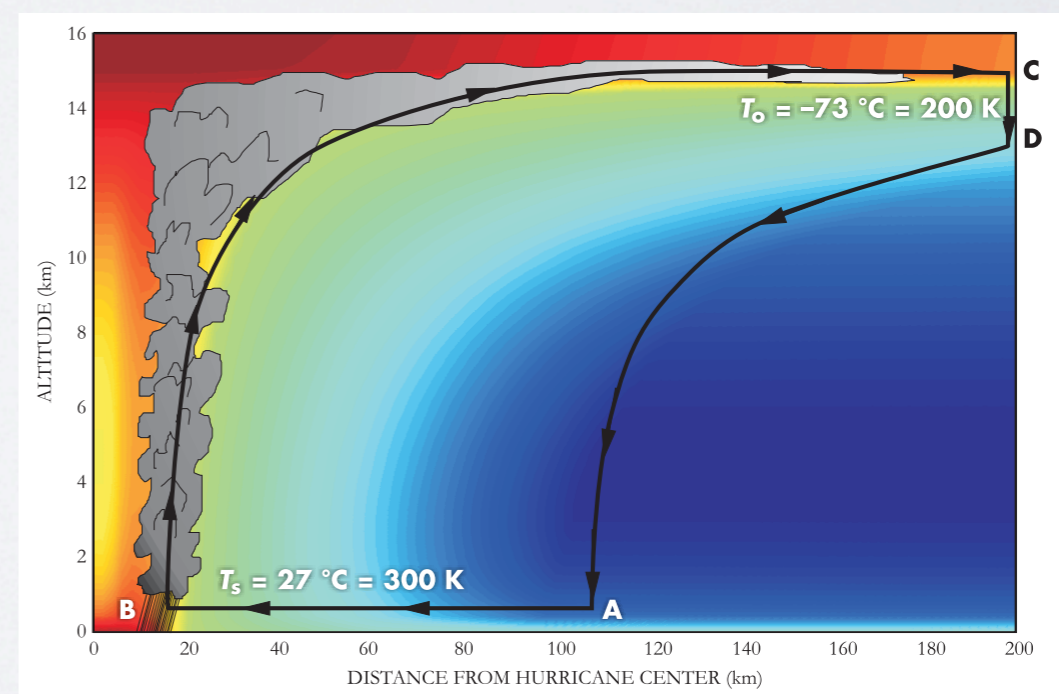


$$u_i = ku_i - k'u_i^3 + \varepsilon(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + q \sin \omega t + \sqrt{D}\xi_i(t)$$

K. Emanuel, Physics Today, 2006

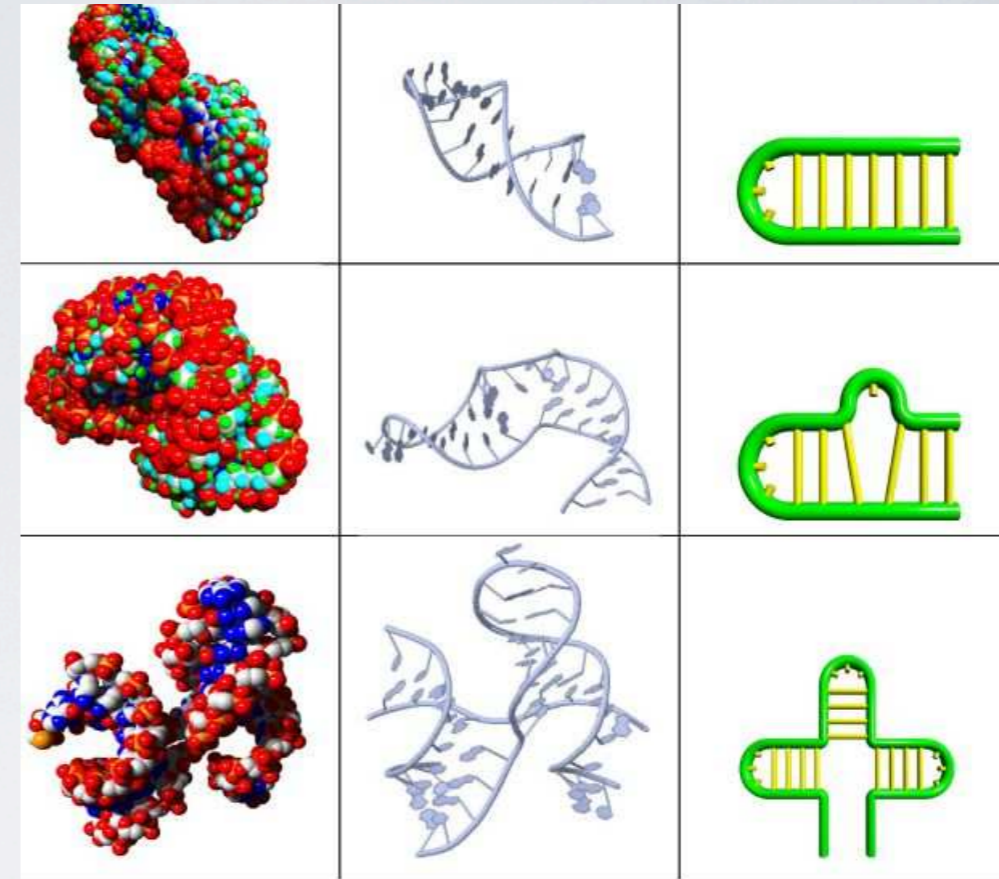
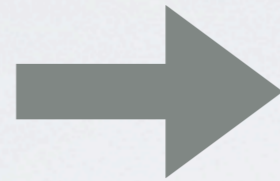
Prędkość zmian ciepła, przy założeniu prędkości wiatru V

$$\dot{Q} = 2\pi \int_0^{r_0} \rho \left[C_k |\mathbf{V}| (k_0^* - k) + C_D |\mathbf{V}|^3 \right] r dr$$



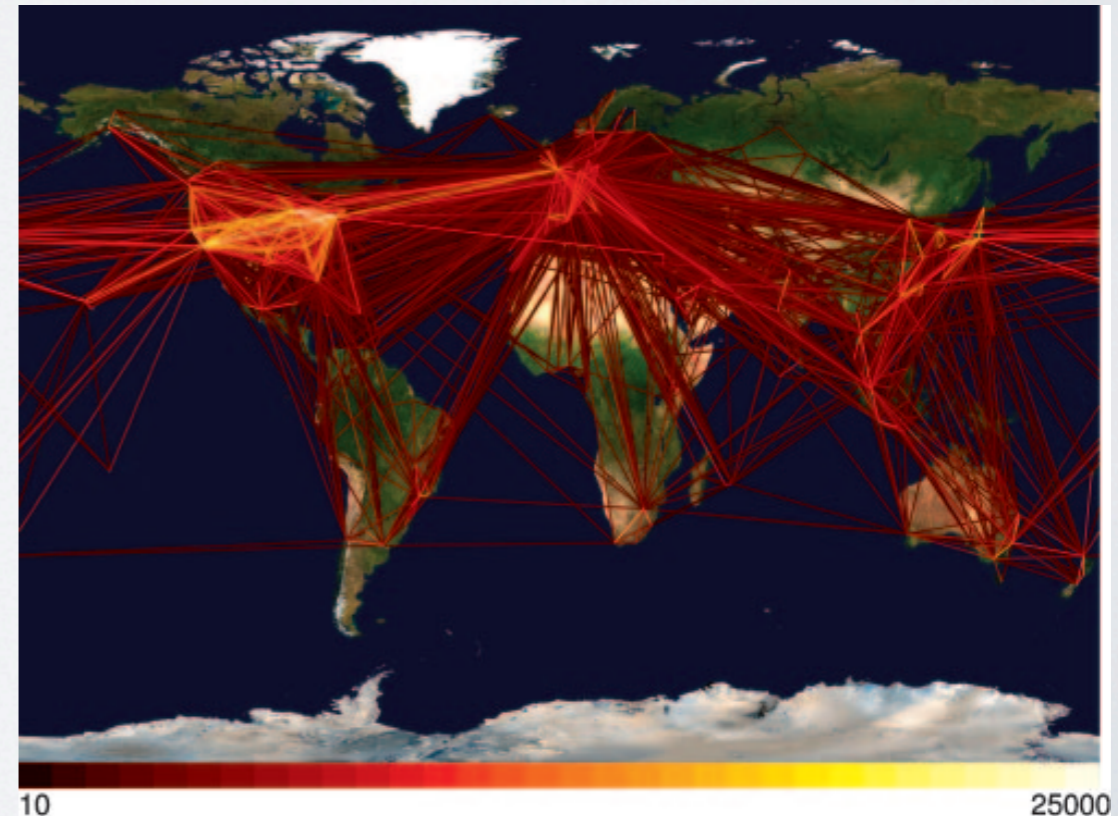
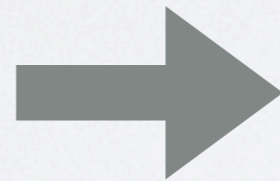
Układy złożone: narzędzia opisu

teoria macierzy przypadkowych



Bon, Vernizzi, Orland, Zee, Topological classification of RNA structures, *Journal of Molecular Biology* 379 (2008), p 900

teoria grafów/sieci



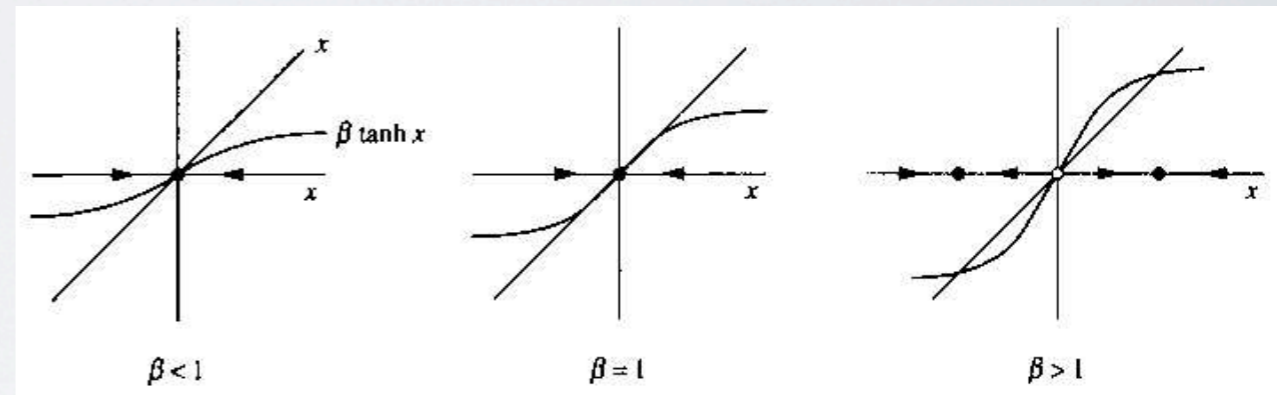
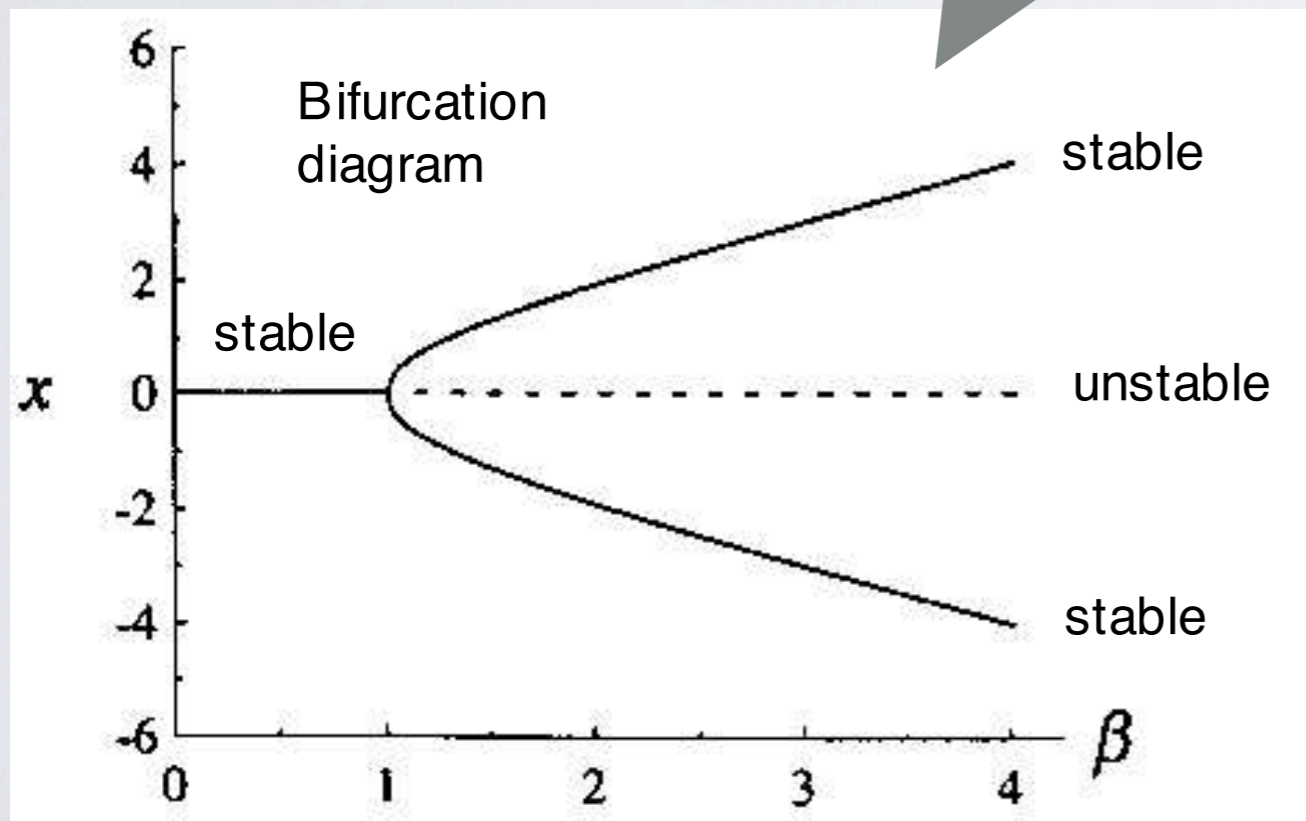
Hufnagel, Brockmann, Geisel, Forecast and control of epidemics, *PNAS*, 101 (2004) p. 15

BIFURKACJE w teorii układów dynamicznych

W układach nieliniowych zmiana parametru kontrolnego skutkuje pojawieniem się *nowych* rozwiązań stacjonarnych

$$\dot{x} = -x + \beta \tanh x$$

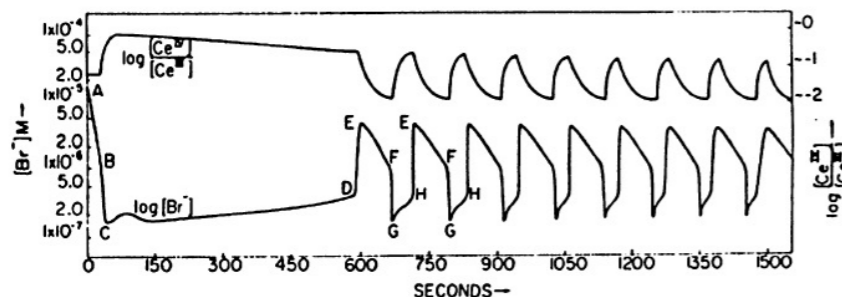
W pobliżu punktów bifurkacji istotną rolę zaczynają odgrywać *fluktuacje*: mogą one decydować o wyborze gałęzi stabilnych stanów stacjonarnych dostępnych w dynamicznej ewolucji układu...



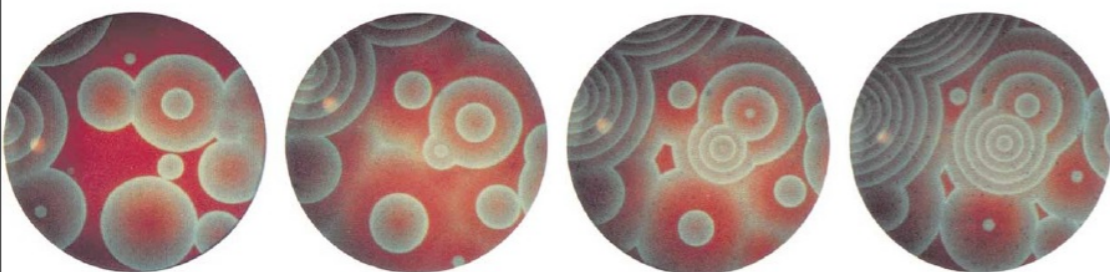
Poszukiwanie rozwiązań stacjonarnych: w prostych przypadkach wystarczą metody graficzne, współcześnie pełne rozwiązania problemów wielowymiarowych otrzymujemy *numerycznie*...

Reakcja Biełousowa-Żabotyńskiego

F. Sagues, I. Epstein Dalton Trans. 1201, (2003)



Oscillatory behaviour in the BZ reaction, showing induction period (A–D) followed by periodic oscillation in the concentrations of several
Reproduced with permission from ref. 16. Copyright 1972 American Chemical Society.



Target patterns in the BZ reaction. Four successive snapshots taken after reaction evolves from initially homogeneous red (dark) solution.
meter of each snapshot is about 10 cm.

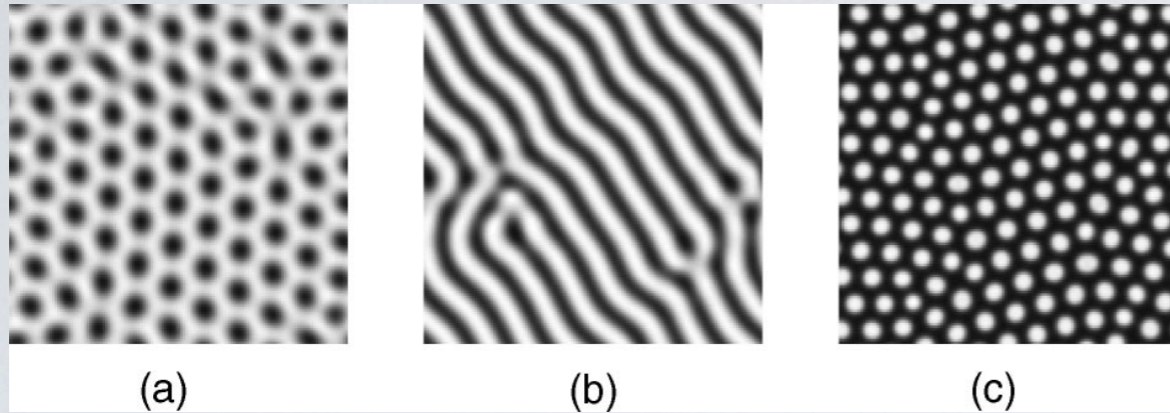
Cykliczna zmiana stężeń reagentów w czasie: przykład zegara chemicznego

SCHEMAT REAKCJI BIEŁOUSOWA-ŻABOTYŃSKIEGO

Substratami są trzy związki nieorganiczne: jony bromianowe (BrO_3^-), jony bromkowe (Br^-) i jony cerawe (Ce^{3+}) oraz kwas malonowy ($\text{CH}_2(\text{COOH})_2$).

1. $2\text{H}^+ + \text{Br}^- + \text{BrO}_3^- \leftrightarrow \text{HOBr} + \text{HBrO}_2$
2. $\text{H}^+ + \text{HBrO}_2 + \text{Br}^- \leftrightarrow 2\text{HOBr}$
3. $\text{CH}_2(\text{COOH})_2 \leftrightarrow (\text{OH})_2\text{C} = \text{CHCOOH}$
4. $\text{HOBr} + \text{Br}^- + \text{H}^+ \leftrightarrow \text{Br}_2 + \text{H}_2\text{O}$
5. $\text{Br}_2 + (\text{OH})_2\text{C} = \text{CHCOOH} \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{Br}^- + \text{BrCH}(\text{COOH})_2$
6. $\text{HBrO}_2 + \text{BrO}_3^- + \text{H}^+ \leftrightarrow 2\text{BrO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
7. $\text{BrO}_2 + \text{Ce}^{3+} + \text{H}^+ \leftrightarrow \text{Ce}^{4+} + \text{HBrO}_2$
8. $\text{Ce}^{4+} + \text{BrO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{BrO}_3^- + 2\text{H}^+ + \text{Ce}^{3+}$
9. $2\text{HBrO}_2 \leftrightarrow \text{HOBr} + \text{BrO}_3^- + \text{H}^+$
10. $\text{Ce}^{4+} + \text{CH}_2(\text{COOH})_2 \leftrightarrow \text{CH}(\text{COOH})_2 + \text{Ce}^{3+} + \text{H}^+$
11. $\text{CH}(\text{COOH})_2 + \text{BrCH}(\text{COOH})_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Br}^- + \text{CH}_2(\text{COOH})_2 + \text{HOC}(\text{COOH})_2 + \text{H}^+$
12. $\text{Ce}^{4+} + \text{BrCH}(\text{COOH})_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Br}^- + \text{HOC}(\text{COOH})_2 + \text{Ce}^{3+} + 2\text{H}^+$
13. $2\text{HOC}(\text{COOH})_2 \leftrightarrow \text{HOCH}(\text{COOH})_2 + \text{C} = \text{CHCOOOH} + \text{CO}_2$
14. $\text{Ce}^{4+} + \text{HOCH}(\text{COOH})_2 \leftrightarrow \text{HOC}(\text{COOH})_2 + \text{Ce}^{3+} + \text{H}^+$
15. $\text{Ce}^{4+} + \text{O} = \text{CHCOOH} \leftrightarrow \text{O} = \text{CCOOH} + \text{Ce}^{3+} + \text{H}^+$
16. $2 \text{O} = \text{CCOOH} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{O} = \text{CHCOOH} + \text{HCOOH} + \text{CO}_2$
17. $\text{Br}_2 + \text{HCOOH} \rightarrow 2\text{Br}^- + \text{CO}_2 + 2\text{H}^+$
18. $2 \text{CH}(\text{COOH})_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_2(\text{COOH})_2 + \text{HOCH}(\text{COOH})_2$

Produktami końcowymi są: dwutlenek węgla, kwas mrówkowy (HCOOH) i kwas bromomalonowy ($\text{BrCH}(\text{COOH})_2$). Barwa roztworu oscyluje pomiędzy żółtą (cer na czwartym stopniu utlenienia) i przezroczystą (cer na trzecim stopniu utlenienia).



Brusselator

B. Pena, C. Perez-Garcia, Phys. Rev. E. 64 (2001) 056213

$$\partial_t X = A - (B + 1)X + X^2 Y + \nabla^2 X,$$

$$\partial_t Y = BX - X^2 Y + D \nabla^2 Y,$$

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} B - 1 + \nabla^2 & A^2 \\ -B & -A^2 + D \nabla^2 \end{pmatrix}$$

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathcal{L} \mathbf{u} + \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} x^2 + 2Axy + x^2 y \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Pierwotny wzór reakcji oscylacyjnej zaproponowany przez Prigogine'a i Lefevera

J. Chem. Phys. 48 (1968) 1695

G. Nicolis, I. Prigogine „Selforganization in Nonequilibrium Systems” Wiley, New York, 1977

Nieliniowy układ reakcji i dyfuzji – dla krytycznych wartości parametrów kontrolnych obserwowane są fluktuacje gęstości zmieniające się periodycznie w czasie i przestrzeni



Gdzie zawodzi tradycyjna termodynamika?

- Aksjomatyczna, „tradycyjna” termodynamika jest elegancką, samozgodną teorią matematyczną.
- Kluczowe pojęcia: stan, funkcja stanu, równanie stanu (wiąże ze sobą parametry stanu).
- Infinitesimalne, adiabatyczne zmiany stanu są odwracalne w czasie

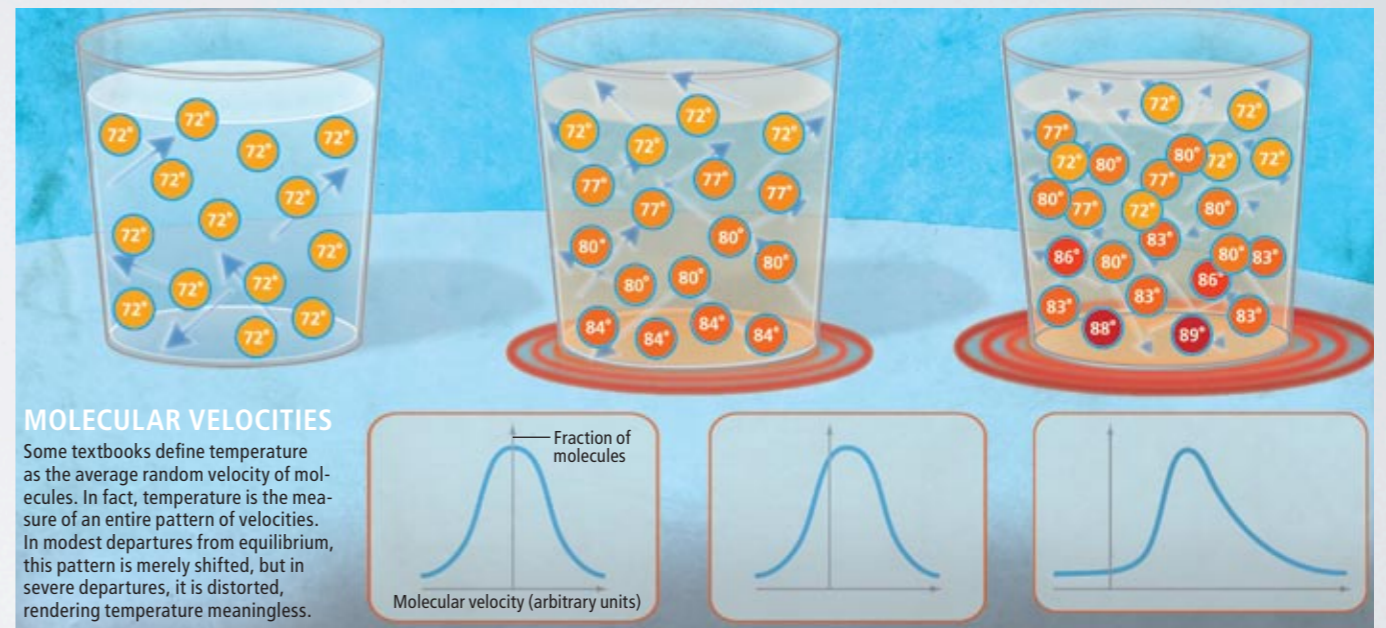
$$dU = \delta Q + \delta W$$
$$\frac{\delta Q}{T} = dS \quad \Delta S \geq 0$$

W stanach odległych od równowagi, traci sens „zwykła” definicja/interpretacja **temperatury**

Tradycyjna termodynamika nie opisuje przejść pomiędzy **metastabilnymi** stanami pośrednimi

Teoria **nie opisuje uporządkowania** w stanach nierównowagowych

DYSSYPACJA NIE MUSI PROWADZIĆ DO CHAOSU!

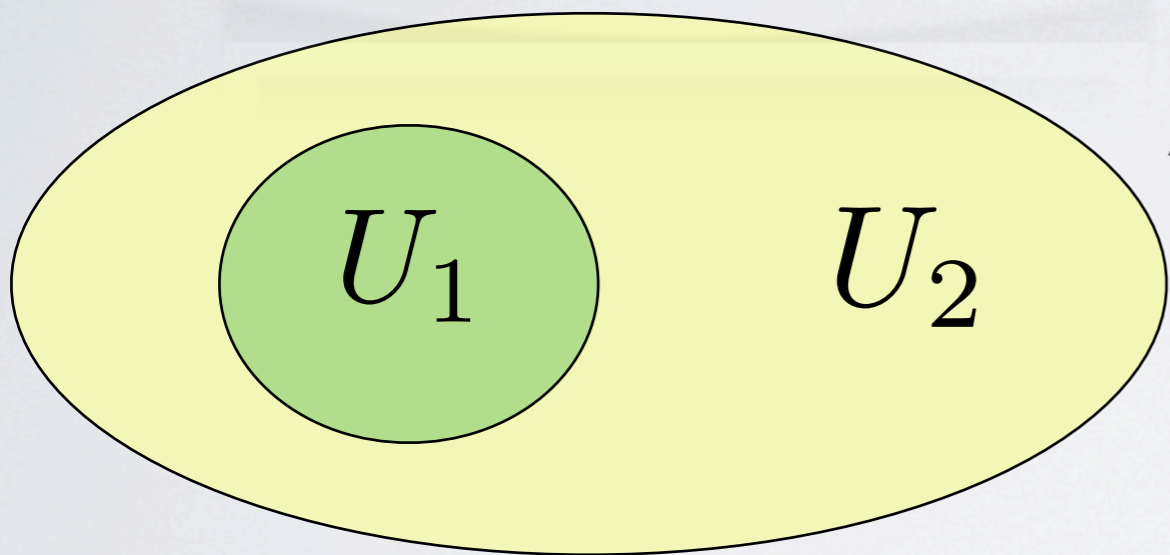


J.M. Rubi, Scientific American, 2008

Warunki równowagi i teoria liniowej odpowiedzi układu

$$S_\nu(E_{\nu 1}, E_{\nu 2}, \dots)$$

$$S_{total} = \sum_\nu S_\nu(E_{\nu 1}, E_{\nu 2}, \dots)$$



$$U_1 \oplus U_2 \text{ izolowane}$$

$$E_j = E_{1j} + E_{2j} = const$$

przy warunkach

$$\delta S_1(E_{1j}) + \delta S_2(E_{2j}) = 0 \quad \delta E_{1j} + \delta E_{2j} = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_{1j}} - \frac{\partial S_2}{\partial E_{2j}} \right) \delta E_{1j} = I_{1j} - I_{2j} \equiv 0 \quad \forall \delta E_{1j}$$

POZA STANEM RÓWNOWAGI

„siły termodynamiczne” $X_j \equiv \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_{1j}} - \frac{\partial S_2}{\partial E_{2j}} \right) \delta E_{1j} = I_{1j} - I_{2j} \neq 0$

siły termodynamiczne generują przepływy

$$\frac{dE_{1,j}}{dt} = \Phi_j$$

W konsekwencji, produkcja entropii wyraża się prostym iloczynem sił i strumieni termodynamicznych

$$\frac{dS}{dt} = \sum_j \frac{\partial S}{\partial A_{1,j}} \frac{dE_{1j}}{dt} = \sum_j X_j \Phi_j$$

Rozwinięta przez Onsagera (~1932) teoria liniowej odpowiedzi (słuszna dla słabych sił X) przewidywała

$$\Phi_j = \sum_k L_{kj} X_k \Rightarrow \frac{dS}{dt} \approx \sum_k L_{kj} X_k X_j$$

IIga zasada narzuca warunek



$$\frac{dS}{dt} \geq 0$$

Termodynamiczna analiza stabilności: Kryterium stabilności Glansdorffa - Prigogine'a nierównowagowych stanów stacjonarnych w oparciu o „nadmiarową produkcję entropii”

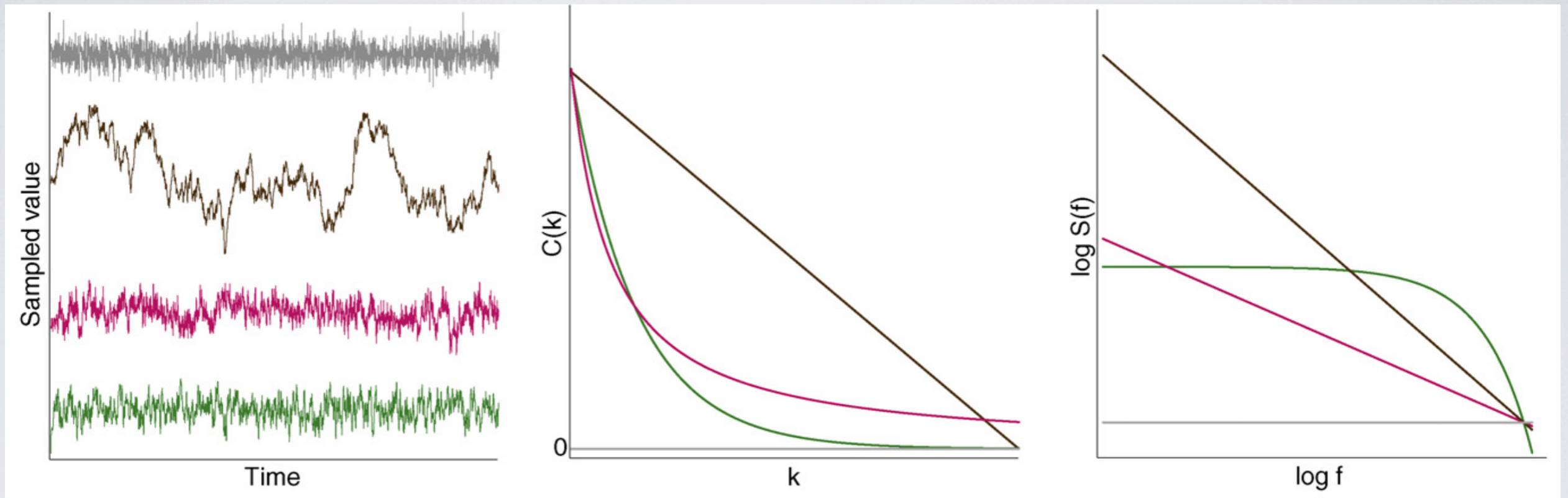
$$(\delta^2 S)_{NSS} < 0$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta^2 S)_{NSS} = \sum_k \delta J_k \delta X_k > 0$$

I. Prigogine, *Science* **201**, 777 (1978) Nobel Lecture

*kryterium lokalne, wystarczający (ale nie **konieczny**)
warunek lokalnej stabilności stanu stacjonarnego*

Prawa skalowania:

układy złożone - przebieg zjawisk obserwowany jako szereg czasowy



szereg czasowy

funkcja korelacji

widmo mocy

Kello et al, Trends in Cognitive Sciences, 14, p.223-232 (2010)

Szum różowy: $S(f) = const \times f^{-\alpha}$

Rozkłady potęgowe obserwowane są dla wielu różnych zjawisk (rozkład długości czasów trwania trzęsień ziemi, energii wybuchu, masy lawin, etc...)

Układy samoorganizujące się są **dyssypatywne**
- charakteryzuje je pobór i straty energii

Uporządkowanie obejmuje całość układu, a
dynamiczna zmienność jest zdeterminowana
fluktuacjami parametrów kontrolnych

Układy samoorganizujące się cechuje wysoki
stopień adaptacji do warunków zewnętrznych
i wysoka odporność na zniszczenia

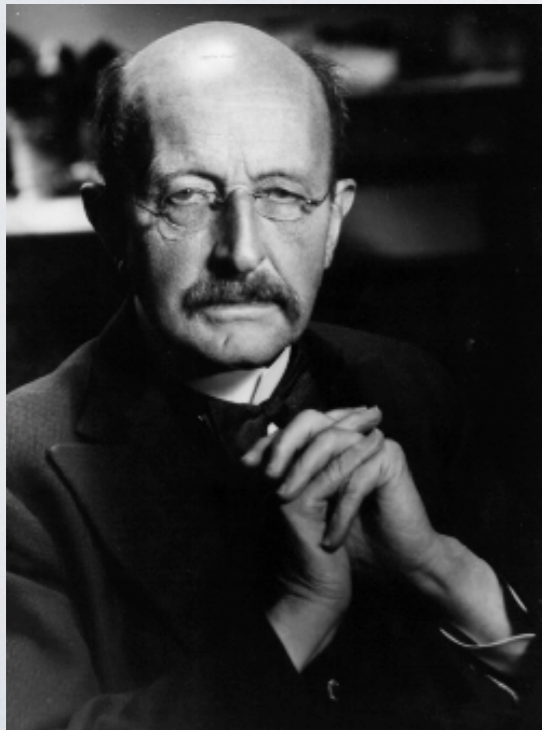
Niespójność? Determinizm mikroskopowych praw natury i kierunkowość zjawisk ewolucyjnych w przyrodzie

Czas jest iluzją...

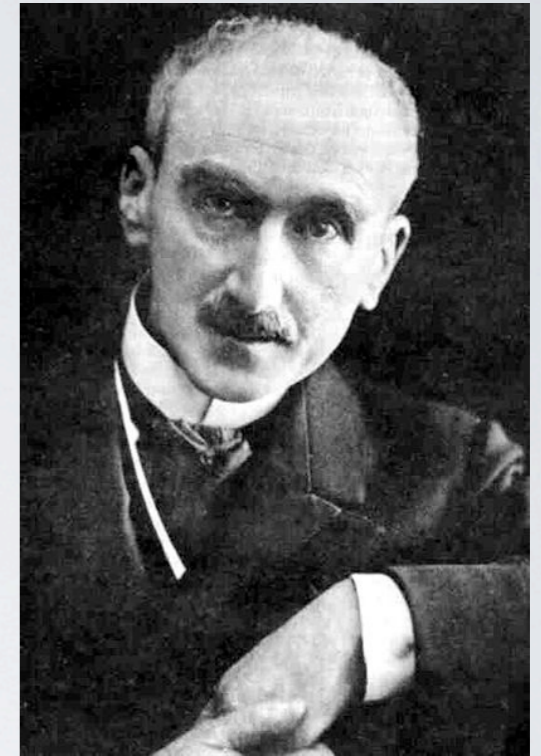
A. Einstein

[...]Im głębiej analizujemy naturę czasu, tym lepiej rozumiemy, że trwanie oznacza inwencję, tworzenie form, stałe doskonalenie absolutnie „nowego”...

Czas rzeczywisty (fizyczny) i czas subiektywny (durée)



Max Planck 1858-1947
Nagroda Nobla 1918



Henri Bergson 1859-1941
Nagroda Nobla 1927

[...]W naturze istnieje wielkość, która zmienia się w tym samym sensie we wszystkich procesach naturalnych...

Byłoby absurdem twierdzić, że zasada wzrostu entropii jest wynikiem naukowej obserwacji, niedoskonałości eksperymentalnego pomiaru...

Dlaczego nie obserwujemy ewolucji odwróconej w czasie? Jakie są przyczyny łamania symetrii odwrócenia w czasie?

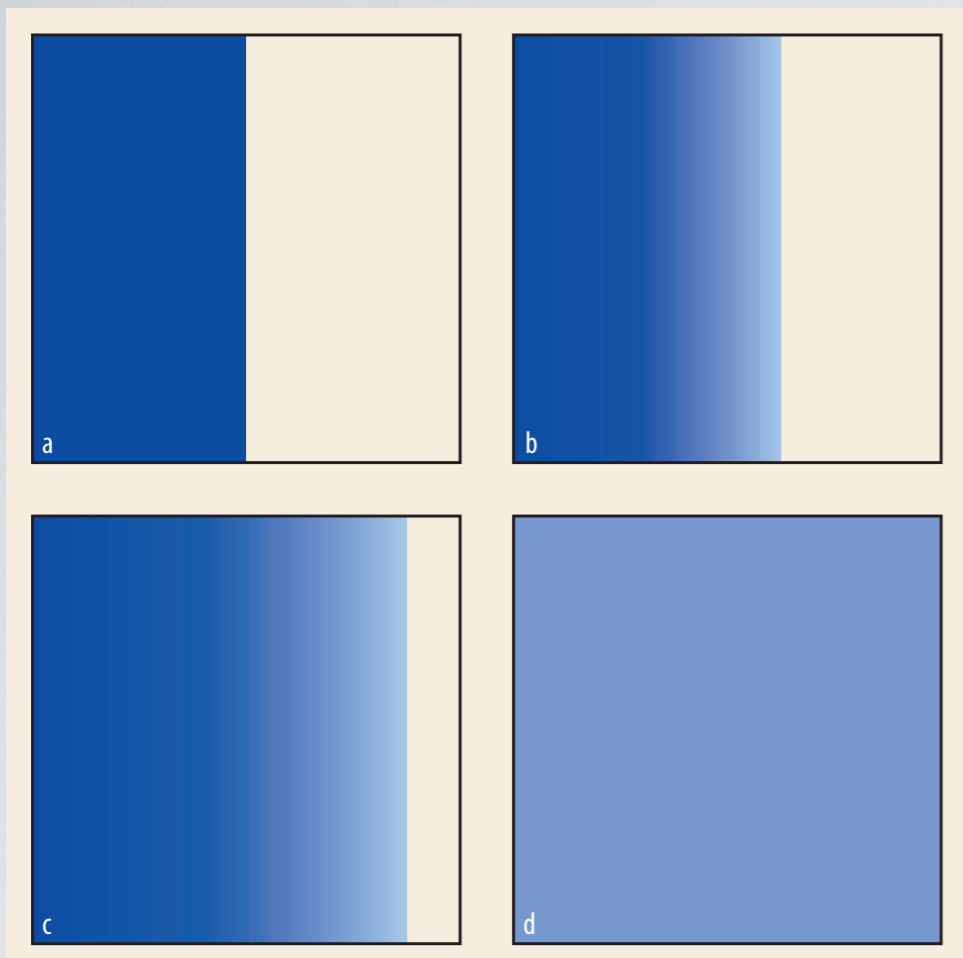


Fig.1 How would you order this sequence of „snapshots” in time? Each represents a macroscopic state of a system containing, for example a fluid with

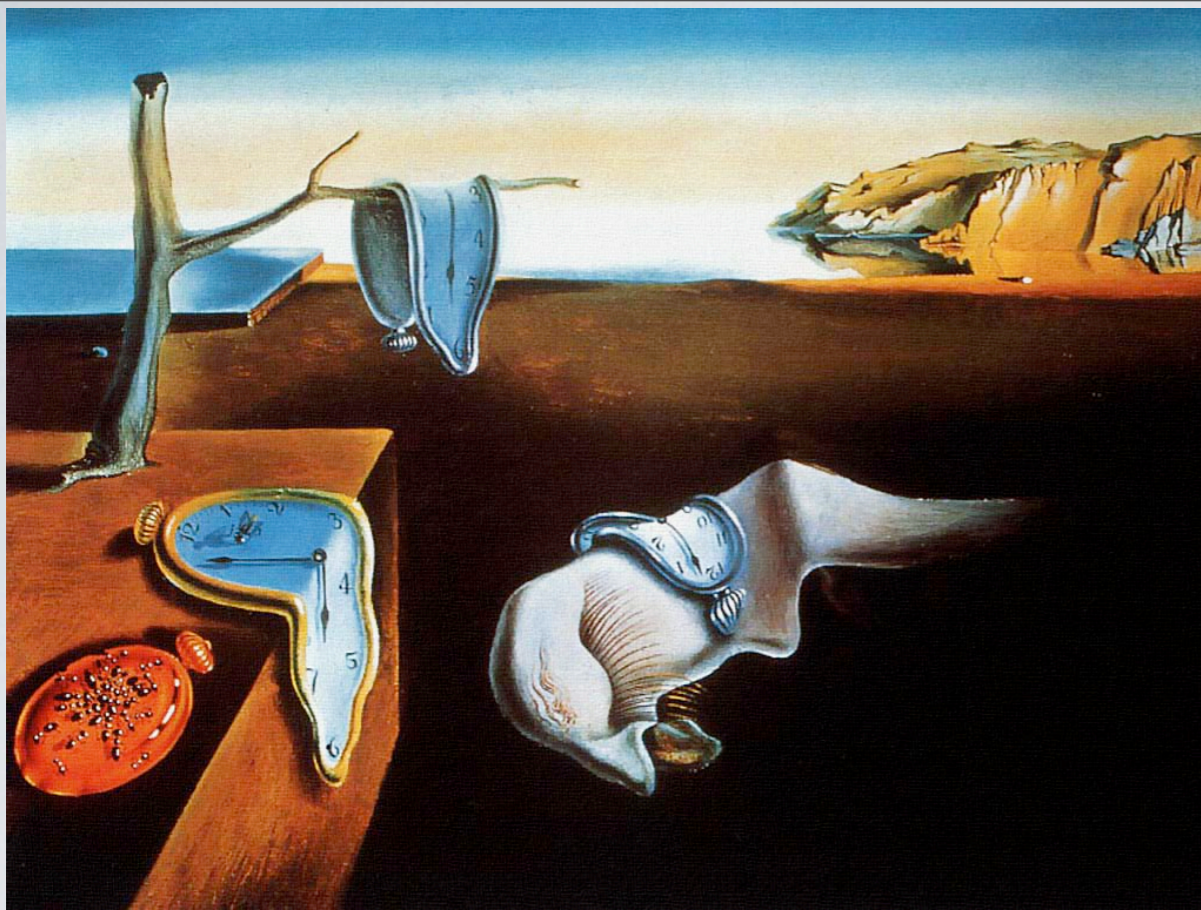
two „differently colored” atoms or a solid in which the shading indicates the local temperature.

- istotne różnice skal mikro i makro
- ewolucja układów dynamicznych determinowana jest nie tylko przez prawa mikroskopowe, ale także przez warunki początkowe
- nie każdy mikroskopowy stan układu będzie ewoluował zgodnie z zasadą wzrostu entropii, a jedynie większość spośród takich stanów

J. Lebowitz, *Physik Journal* 6, (2007)
41-46 (M. Planck Medaille)

$$RX = (r_1, -p_1, r_2, -p_2, \dots, r_N, -p_N)$$

$$X = (r_1, p_1, r_2, p_2, \dots, r_N, p_N)$$



The persistence of memory, S. Dali (1931)

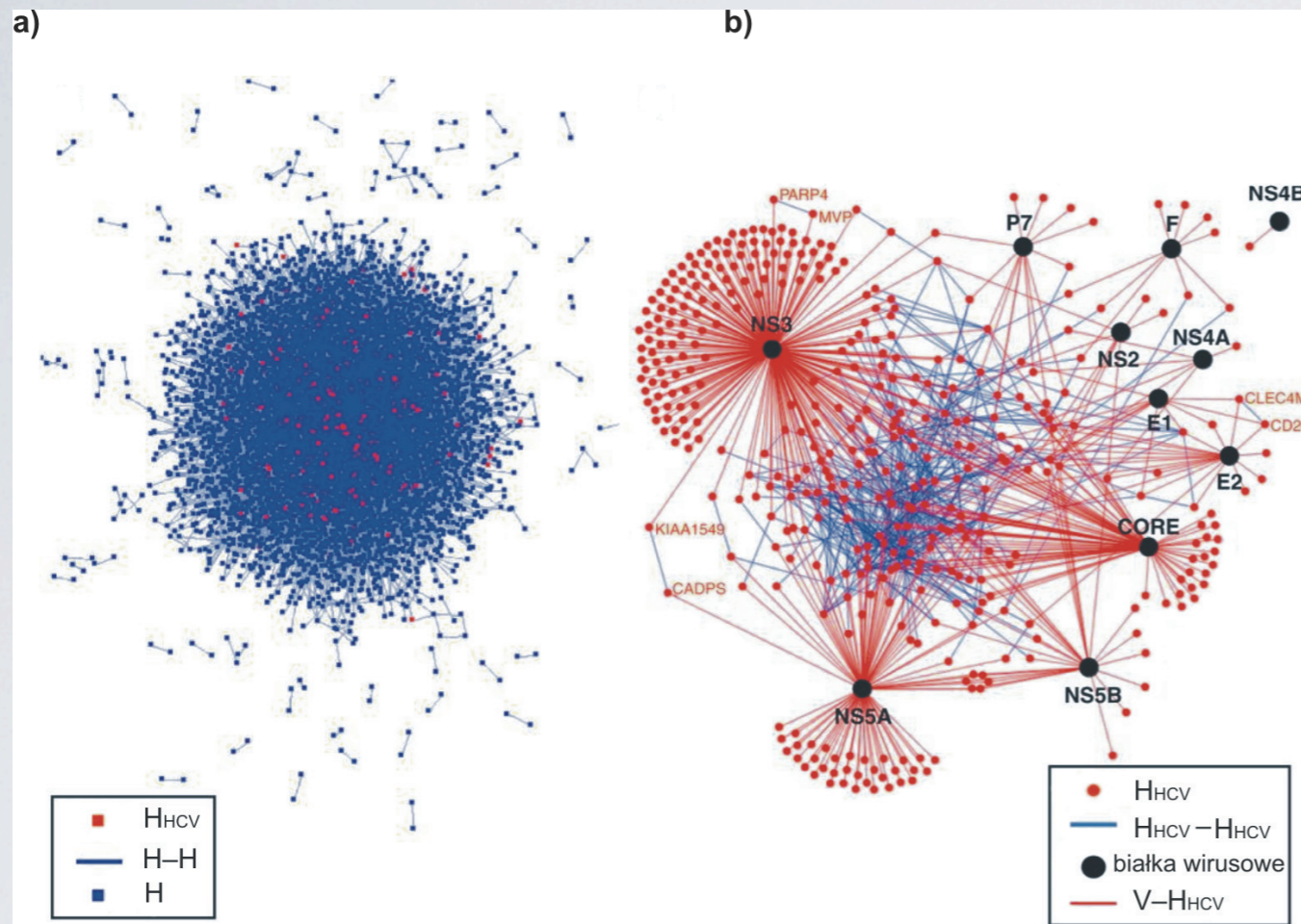
W podejściu (filozofii) Szkoły Brukselskiej, kierunkowość czasu jest podstawowym zjawiskiem wynikającym z dynamiki złożonych układów fizycznych

Termodynamiczna strzałka czasu wyznaczana procesami dyfuzji, wzrastającymi korelacjami i pojawieniem się zachowań kolektywnych w układach wielociałowych

Rozszerzenie teorii Poincaré: układy równań dynamicznych są niecałkowalne jeśli zawierają **rezonanse** pomiędzy różnymi stopniami swobody

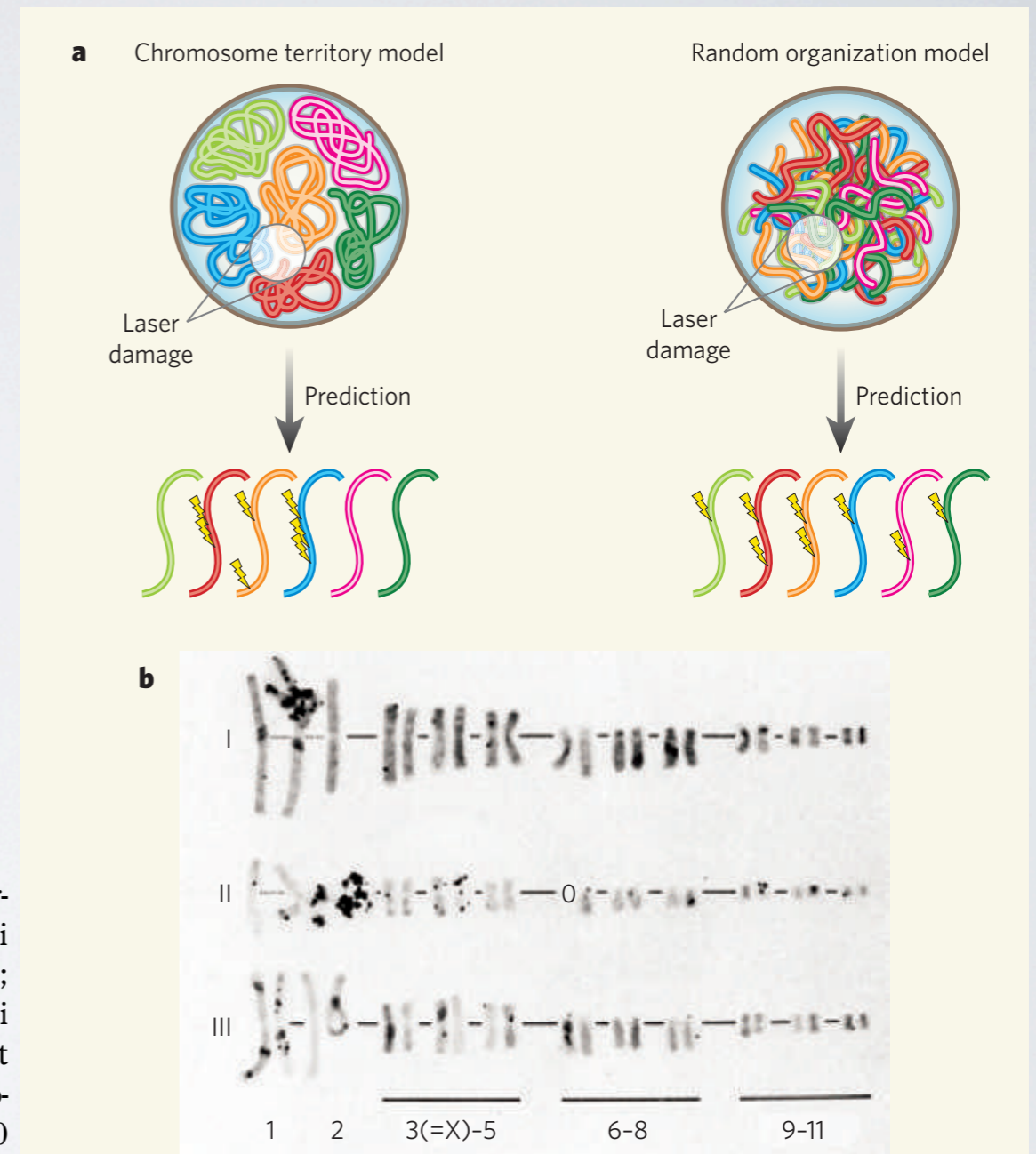
Rezonans: przejściowy stan metastabilny układu stwarzający możliwość efektywnego przekazu energii

Nurty współczesnej teorii układów złożonych (podejście synergetyczne) w naukach biologicznych (biologia systemów)



Ryc. 9. Graficzna ilustracja interakcji między białkami HCV i białkami człowieka. a) Sieć interakcji białek człowieka (H-H; kolor niebieski), punkty w kolorze czerwonym oznaczają cząsteczki białka po zakażeniu HCV. b) Sieć interakcji V-H. Węzły w kolorze czarnym – białka wirusowe; w kolorze czerwonym – białka ludzkie; łączniki czerwone – interakcja między białkami ludzkimi i wirusowymi; węzły niebieskie – interakcje między białkami ludzkimi. Największy komponent sieci (środek ryciny) obejmuje 196 cząsteczek białkowych. Wg de Chasse B., Navratil V., Tafforeau L. (2008): *Hepatitis C virus infection protein network*. „Molecular Systems Biology”, 4: 230

M. Chorąży, Nauka 1/2011



T. Misteli, Nature, 445 379-381 (2007)

Podsumowanie i „luźne” wątki...

Powszechność układów złożonych i zjawisk samoorganizacji czasowo-przestrzennej w różnych skalach obserwacji przyrody (od biologii po kosmologię..) sugeruje, że zrozumienie charakteru „praw”, mechanizmów odpowiedzialnych za „samoporzędkowanie” i spontaniczne powstawanie struktur może być kluczem do spójnego opisu materii.

Czy (nieliniowa) dynamika, przyczynowość i przypadek (fluktuacje) są wystarczającymi elementami tego opisu?



*[...] Przesłanie Jacquesa Monoda mówi: życie, a w szczególności człowiek jest niereligijnym cudem. Według mnie jest inaczej. Materia posiada potencjał związany z samoorganizacją, z którego właściwie nie zdawano sobie sprawy w czasach Monoda. Z drugiej strony, przesłanie Sartre'a i Camusa mówi, że wszechświat jest absurdalny. To poczucie absurdu jest naturalne we wszechświecie, w którym człowiek jest oderwany od otaczającej go przyrody. Walczyłem z tymi poglądami wykazując, że istnieje pewna racjonalność, ale że zawiera ona **niepewność i strzałkę czasu...***

I. Prigogine

(wywiad z E.Lévy, Le Point, 18.01, 2002)

Dziękuję za uwagę



Plus ratio quam vis