

тационное моделирование методом статистических испытаний (Монте-Карло).

Процесс моделирования статистической деструкции включает операции: генерацию графа, имитирующего анализируемую топологическую структуру макромолекулы, узлами которого являются мономерные звенья, а ребрами – связи между ними; нумерацию ребер графа; многократное «разыгрывание» номеров удаляемых ребер (т.е. номеров разрываемых связей); подсчет числа и размеров фрагментов ( $x$ -меров), образующихся в результате разрыва связей; построение дифференциальных кривых распределения  $x$ -меров по молекулярным массам (кривых ММР).

В ходе исследования процесса делигнификации древесины рассмотрены такие структуры: линейная; дендровидная с разветвлениями от каждого узла; дендровидная с редкими нерегулярными (случайными) разветвлениями; сетчатая нерегулярная (с разной степенью «сшивки»). Две первые структуры включены в исследование в качестве тестов для оценки информативности и точности метода.

Установлено, что статистическая деструкция полимеров с унимодальным исходным ММР и сложной (дендровидной и сетчатой) топологической структурой макромолекул сопровождается появлением бимодальных кривых ММР образующихся продуктов разрушения. Следствием существования циклов (внутримолекулярных «сшивок») в макромолекулах является увеличение массовой доли и степени полимеризации высокомолекулярных фракций и уменьшение доли низкомолекулярных фракций в продуктах разрушения. По мере увеличения степени деструкции кривые ММР становятся унимодальными. Моделирование позволяет проследить изменение вида и параметров ММР полимера в зависимости от топологической структуры макромолекул. Этот прием успешно использован авторами сообщения при анализе особенностей промышленных способов делигнификации древесины.

#### **ПОЛИЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ КИНЕТИКА КАК АППАРАТ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ДЕЛИГНИФИКАЦИИ ДРЕВЕСИНЫ**

Пен В.Р., Шапиро И.Л., Мирошниченко И.В.  
*Сибирский государственный технологический  
университет  
Красноярск, Россия*

Согласно современным представлениям о кинетике реакций в конденсированных средах, существует несколько кинетических режимов, зависящих от отношения времен релаксации системы и ее пребывания вблизи энергетического барьера. Когда это отношение достаточно велико, уравнение кинетической кривой приобретает форму интегрального уравнения Фредгольма

первого рода. В уравнение входит функция распределения констант скоростей, характеризующая неоднородность реагирующего вещества. Такой режим называется полиэкспоненциальным (полихронным). Он наблюдается в средах с малой подвижностью, в том числе с участием полимеров, и обусловлен, как правило, энергетической неоднородностью связей во вступающих в реакцию соединениях, стохастической природой влияния растворителя на элементарный акт химического взаимодействия, медленной релаксацией системы.

Типичным примером процесса с полихронной кинетикой является промышленная делигнификация древесины. Лигнин представляет собой нерегулярный полимер со связями разных типов между мономерными фенилпропановыми звеньями и со сложной топологической структурой, а его разрушение с последующим диффузионным удалением протекает в среде анизотропной лигноуглеводной матрицы.

Для вычисления функции плотности распределения констант скоростей по экспериментальным данным требуется решение уравнения Фредгольма. Эта задача «некорректна по Адамару». Существуют разные методы нахождения приближенных решений. Их использование связано с принятием ряда ограничений и произвольных допущений и не всегда приводит к желаемому результату.

Авторами сообщения выполнен сравнительный анализ нескольких предложенных методов решения (метод характеристических времен, дифференциальный, Тихонова). Хотя все проверенные методы при обработке результатов щелочной и окислительной делигнификации древесины дали не сильно различающиеся (сопоставимые по точности аппроксимации) решения, предпочтение отдано методу Тихонова как наиболее теоретически обоснованному, устойчивому и информативному. Его использование позволило получить адекватные уравнения кинетики натронной, сульфатной, натронно-антрахиноновой и пероксидной делигнификации.

#### **ПРИНЦИП ЛИНЕЙНОСТИ СВОБОДНЫХ ЭНЕРГИЙ В КИНЕТИКЕ ДЕЛИГНИФИКАЦИИ ДРЕВЕСИНЫ**

Пен В.Р., Шапиро И.Л.  
*Сибирский государственный технологический  
университет  
Красноярск, Россия*

Исследование кинетики щелочной делигнификации древесины выявило полихронный характер протекающего процесса деградации лигнина – одного из основных полимерных компонентов древесного вещества. Анализ свойств распределения массовых долей его кинетических ансамблей по эффективным значениям энергии

активации  $E$  и предэкспоненциальных множителей уравнения Аррениуса  $A$  в процессах натронной, натронно-антрахиноновой и сульфатной промышленной варки целлюлозы показал, что между  $E$  и  $\ln A$  существует линейная зависимость. Это явление, известное как кинетический компенсационный эффект, распространено в химической, биологической и физической кинетике и проявляется главным образом в жидкофазных и твердофазных системах, в том числе в полимерах. Появление эффекта может быть теоретически обосновано, если интерпретировать набор кинетических ансамблей лигнина как реакцию серию, члены которой имеют энтропийно-энергетические характеристики, связанные принципом линейности свободных энергий.

Деструкция лигнина при щелочной делигнификации является следствием разрыва главным образом алкил-арильных эфирных связей между фенилпропановыми мономерными звеньями макромолекул. Существование кинетического компенсационного эффекта дает основание полагать, что основные процессы деструкции протекают с

участием единого ядра активированного комплекса, т.е. кинетические ансамбли лигнина как субъекта полихронной кинетики могут рассматриваться в качестве членов реакционной серии с одинаковыми реакционными центрами и разным «окружением».

Следствием обсуждаемого механизма являются наблюдавшиеся в экспериментах изокинетические соотношения – линейные связи между энтропией и энтальпией реакций с участием кинетических ансамблей, а также существование изокинетических температур порядка 500...510 К, при которых константы скоростей однотипных реакций деструкции для всех кинетических ансамблей лигнина одинаковы.

В рамках теории переходного состояния Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (теория РРКМ), развитой М.Шахпароновым для неидеальных систем, впервые получены оценки трансмиссионных коэффициентов для реакций щелочной деструкции лигнина при изокинетических температурах.

### *Современная теория информации в естественных науках*

#### **ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭКСПЛИКАЦИЯ КАТЕГОРИЙ КАЧЕСТВА И СВОЙСТВА**

Бондаревский А.С.  
ОАО «Ангстрем-М»,  
Москва, Зеленоград, Россия

«Ибо нет ничего тайного, что не сделалось бы явным, ни сокровенного, что не сделалось бы известным и не обнаружилось бы»  
*«Евангелие «От Луки  
святое благовествование»*

В настоящее время известны две трактовки понятия качества. Здесь, - качества, как:  
- самости (принято в философии),  
- степени совершенства (принято в системе производства товаров и услуг).

Ниже имеется в виду понятие качества как самости, являющееся, таким образом, категорией.

Что же касается категории свойства, то в наиболее продвинутом виде оно раскрывается, как «внешнее проявление (явление “во вне”) качества», или же, как то, посредством чего качество из «вещи в себе» превращается в «вещь для нас».

Но при таком раскрытии всё же остаётся неясным, *каким* именно проявлением качества является свойство. И остаётся неясным механизм этого проявления. В результате возникают, например, определения типа: информация - это «свойство материи». А это определение, например, можно понять так, что информация - это есть

проявленная (явленная «во-вне») материя. Но проявленная материя - это есть нечто с ней *одно-сущностное*. А это значит, что проявленная материя - это тоже материя. Т.е. информация и материя - это одно и то же? А есть ещё и определение вида: «Энергия - это свойство материи». Здесь свойство материи - это уже, бесспорно, материя. Так всё-таки, что же такое свойство?

Опуская имеющие место посылки, констатируем, что свойство категории качества - это есть некая реалья, которая может быть - непосредственно (как таковое, без опосредования), *воспринята* человеком. Здесь, - воспринято в том смысле, что «превращено» в свободную информацию [1] - «знание» человека о качестве. И воспринято посредством той или иной из информационных операций класса «Восприятие» [1] - единственно возможного средства получения знания-свободной информации. В данном случае воспринято:

- *антропогенно*-чувственно,
- *техногенно*.

При этом качество непосредственно как таковое (здесь, - без использования понятия свойства), ни антропогенно-чувственно, ни техногенно воспринято быть не может. (Как таковое, качество может быть воспринято только сверхчувственно - здесь не рассматривается).