Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1968

УДК 534.014.4

М. С. ПОЛЯКОВА, Ю. М. РОМАНОВСКИЙ, Г. А. СИДОРОВА

О СИНХРОНИЗАЦИИ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ПРОСТРАНСТВЕ

Рассматривается химическая автоколебательная реакция, протекающая в одномерном пространстве с диффузией. Получены синхронные режимы и исследована их устойчивость.

Последние годы многие исследователи: биологи, физики и математики пытаются объяснить ряд важных физиологических процессов, протекающих периодически во времени на основе кинетических уравнений, описывающих биохимические превращения внутри живой клетки [1—3]. С другой стороны, начаты успешные исследования гомогенных химических автоколебательных реакций, осуществленных в пробирке [4—5], которым также сопоставляются математические модели кинетических уравнений [6].

Одной из интереснейших особенностей колебаний, наблюдаемых в соседних клетках живых тканей или же в различных частях химических реакторов, является их синхронность. Важность этого обстоятельства для живых организмов неоднократно подчеркивалась различными авторами [1, 8, 9].

Наиболее естественно синхронизация объясняется диффузией веществ, концентрации которых колеблются.

В рамках линейной теории удается проследить, как даже в системах с отрицательным затуханием диффузия приводит к «рассасыванию» начальных неравномерно заданных в пространстве концентраций. В работе [7], в частности, рассматривалось поведение в «одномерном» пространстве системы затухающих колебательных реакций Лотка [10], описываемой уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y}{\partial t} &= k_0 - k_1 XY + D_1 \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2}, \\ \frac{\partial X}{\partial t} &= k_1 XY - k_2 X + D_2 \frac{\partial^2 X}{\partial z^2}. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $X(z, t)$, $Y(z, t)$ — концентрации реагирующих веществ, D_1, D_2 — соответствующие им коэффициенты диффузии; k_0, k_1, k_2 — константы скоростей химических реакций.

В линеаризованной системе (1) диффузия играет роль дополнительного затухания, тем большего, чем выше номер пространственной моды, заданной в начальный момент $X_n^0 = A_n \cos \frac{\pi n}{l} z$. Если колебательная система неустойчива, то не все начальные моды X_n^0 будут нарастать, а лишь те, номера которых удовлетворяют условию самовозбуждения

$$\delta + \frac{D_1 + D_2}{2} \left(\frac{\pi n}{l} \right)^2 \leqslant 0, \tag{2}$$

где $\delta = -\frac{k_1 k_2}{2k_2}$ — отрицательное затухание системы. Таким образом, со временем в реакторе останутся лишь моды с малыми номерами n.

Очевидно линейное рассмотрение совершенно недостаточно для объяснения механизма наиболее интересных случаев автоколебательных реакций в нелинейных системах. Опираясь на результаты линейной теории, перейдем к исследованию синхронизующей роли диффузии в распределенной автоколебательной системе.

Представим себе одномерный (для простоты) реактор, пространство которого заполнено «точечными» химическими генераторами типа Ван-дер-Поля, связанными между собой диффузией. В предположении мягкого режима генераторов имеем систему уравнений (3) для отклонений концентраций реагирующих веществ от положения равновесия x, y:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial t} &= -\omega_0^2 x + 2\delta (1 - \varepsilon x^2) y + D_1 \frac{\partial^2 y}{\partial z^2}, \\ \frac{\partial x}{\partial t} &= \qquad\qquad\qquad\qquad y + D_2 \frac{\partial^2 x}{\partial z^2}. \end{aligned} \tag{3}$$

Стенки реактора считаем непроницаемыми, отсюда граничные условия будут иметь вид

$$\frac{\partial x}{\partial z}(0, t) = \frac{\partial x}{\partial z}(l, t) = \frac{\partial y}{\partial z}(0, t) = \frac{\partial y}{\partial z}(l, t) = 0. \tag{4}$$

В качестве начального выбираем некоторое неравномерное распределение концентраций веществ.

Запишем систему (3) в виде одного уравнения ($\varepsilon = 1$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \omega_0^2 x = 2\delta \Big[(1 - x^2) \frac{\partial x}{\partial t} - D_2 (1 - x^2) \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \Big] - \\ - D_1 D_2 \frac{\partial^4 x}{\partial z^4} + (D_1 + D_2) \frac{\partial^3 x}{\partial t \, \partial z^2}. \end{aligned} \tag{5}$$

Будем считать, что $\omega_0 \gg \delta$ и условие самовозбуждения (2) выполнено. В этом случае наиболее существенную роль играет лишь диффузионный член $(D_1 + D_2) \frac{\partial^3 x}{\partial t z^2} \approx \omega_0 \delta$, тогда как два других диффузионных члена имеют порядок δ^2.

Применяя для отыскания стационарных решений (5) метод медленно меняющихся амплитуд, будем искать $x(z, t)$ в виде

$$x(z, t) = A(z, t) \cos [\omega_0 t + \theta(z, t)], \tag{6}$$

где $A(z, t)$, $\theta(z, t)$ — медленно меняющиеся функции времени. Получаем укороченные уравнения для амплитуды и фазы — уравнения в частных производных

$$\frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = \delta\left(\bar{A} - \frac{1}{4}\bar{A}^3\right) - \frac{1}{2}(D_1 + D_2)\left[-\frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial z^2} + \bar{A}\left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}\right)^2\right], \tag{7}$$

$$\bar{A}\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = (D_1 + D_2)\left[\frac{\partial \bar{A}}{\partial z}\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} + \frac{1}{2}\bar{A}\frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial z^2}\right].$$

Из уравнения для фазы и граничных условий (4) получаем постоянство стационарной фазы в каждой точке z пространства реактора: $\theta(z) \equiv \text{const}$.

Уравнение для стационарной амплитуды, следовательно, преобразуется в обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2\bar{A}}{\partial z^2} = \frac{2\delta}{D_1 + D_2}\bar{A}\left[\frac{\bar{A}^2}{4} - 1\right] \tag{8}$$

с тривиальным решением $\bar{A} = 2$.

Нахождение остальных решений уравнения (8) приводит к эллиптическому интегралу

$$\int\limits_{-\bar{A}_0}^{\bar{A}} \frac{d\bar{A}}{\sqrt{(\bar{A}_0^2 - \bar{A}^2)\left(1 - \frac{1}{8}\bar{A}_0^2 - \frac{1}{8}\bar{A}^2\right)}} = \sqrt{\frac{\delta}{D_1 + D_2}}\int\limits_0^z dz. \tag{9}$$

Константа $\bar{A}_0$ — значение $\bar{A}(z)$ в точке $z = 0$, которое находится из трансцендентного уравнения (10)

$$\sqrt{\frac{2\delta}{D_1 + D_2}}\, l = \frac{K(\varkappa)\cdot 2n}{\sqrt{1 - \frac{1}{8}\bar{A}_0^2}} = 2n\Psi(\bar{A}_0), \tag{10}$$

где $\varkappa = \dfrac{\bar{A}_0}{\sqrt{8 - \bar{A}_0^2}}$ и $K(\varkappa)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, $n = 0, 1, 2, \ldots$.

На рис. 1 построена зависимость $\psi = \psi(\bar{A}_0)$. Зная отношение параметров $\delta/(D_1 + D_2)$ и l, по этому графику можно найти стационарные значения амплитуд для $n = 0, 1, 2, 3\ldots$ Из этой же зависимости следует, что максимальное значение n, при котором $\bar{A}_0 \neq 0$, определяется неравенством (2), полученным из линейной теории.

На рис. 2 представлены две «разрешенные» формы автоколебаний при $\dfrac{\delta}{D} = 50$ $(D_1 = D_2 = D)$ и $l = 1$ (сплошные кривые). На этом же рисунке показаны соответствующие косинусоидальные зависимости (пунктирные кривые). Точками отмечены стационарные решения уравнений (3), полученные на ЭЦВМ методом конечных разностей.

Дополнительное аналитическое исследование и проведенные вычисления на цифровых машинах показали, что лишь тривиальное решение $\bar{A} = \text{const}$ является устойчивым относительно малых отклонений любой формы. Все остальные стационарные формы $\bar{A}_n(z)$ неустойчивы. Предварительные результаты исследования системы (3) на ЭЦВМ при $\varepsilon \gg 1$ (релаксационных систем) говорят о том, что устойчиво тоже только тривиальное решение $\bar{A} = \dfrac{2}{\sqrt{\varepsilon}} = \text{const}$. Переходные же процессы в простран-

стве представляются в виде волн с крутыми фронтами, распространяющимися на отрезке $0 \leqslant z \leqslant l$.

Известные химические и биохимические автоколебательные системы далеки от вида (3). Однако можно утверждать, что если они имеют мягкое возбуждение и концентрации изменяются во времени по гармоническому закону, то полученные нами выводы качественно будут описывать поведение таких систем в пространстве с учетом диффузии.

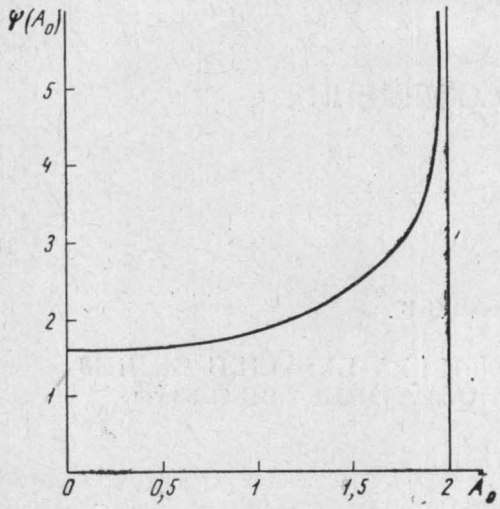

Рис. 1

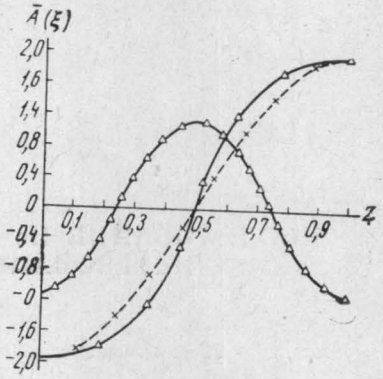

Рис. 2

ЛИТЕРАТУРА

1. Гудвин Б. Временная организация клетки. М., «Мир», 1966.
2. Чернавская Н. М., Чернавский Д. С. «Успехи физич. наук», **72**, 627, 1960.
3. Мошков Б. С., Фукшанский Л. Я., Юзефович Г. И. ДАН СССР, **167**, 440—443, 1966.
4. Жаботинский А. М. ДАН СССР, **157**, 392, 1964.
5. Жаботинский А. М. «Биофизика», **9**, 306, 1964.
6. Корзухин М. Д., Жаботинский А. М. В сб.: «Колебательные процессы в биологических и химических системах». Тр. Всесоюзного симпозиума Пущино-на-Оке 1966 г. М., «Наука», 1967.
7. Романовский Ю. М., Сидорова Г. А. В том же сборнике.
8. Винер Н. Новые главы кибернетики. М. «Советское радио», 1963.
9. Пентегова Л. И., Романовский Ю. М., Чернавская Н. М., Чернавский Д. С. «Вестн. Моск. ун-та», сер., физ., астрон., № 3, 49, 1966.
10. Lotka A. J. Elements of Physical biology. Baltimore, 1925.

Поступила в редакцию
12.4 1968 г.

Кафедра
общей физики для мехмата