

М. С. ПОЛЯКОВА

О ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУРАХ В ОДНОЙ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ С ДИФФУЗИЕЙ

Рассматриваются пространственно-периодические стационарные решения, или диссипативные структуры в одной модели химической реакции с диффузией. Получены зависимости амплитуды диссипативной структуры от длины волны, а также исследована их устойчивость.

В последние годы значительно возрос интерес к исследованию пространственных эффектов в распределенных химических системах с диффузией. Большинство авторов выделяет два класса режимов, возможных в указанных системах: режим бегущих волн и стационарные периодические структуры, или диссипативные структуры (ДС) [1]. В данной работе будут рассмотрены лишь режимы второго типа.

Попытки получить ДС в химических системах с диффузией, описываемых линейными уравнениями в частных производных, были предприняты в [2 и 3] для сферической клетки, а в [4 и 5] для одномерного реактора и двух реагирующих веществ. Термодинамический аспект проблемы развит в работах [1 и 6]. В них было показано, что ДС могут возникнуть лишь вдали от положения термодинамического равновесия и при условии наличия в системе химических реакций автокаталитических и кросскаталитических стадий, т. е. положительных обратных связей. Оба рассмотрения фактически отвечают на вопрос: когда могут возникнуть ДС, т. е. дают условия их самовозбуждения. Факт существования таких структур в нелинейных системах устанавливается путем решения на ЦВМ отдельных примеров.

ДС представляют большой интерес для теоретической биологии как модель процесса дифференциации тканей. При объяснении дифференциации многие авторы используют предположение о триггерном механизме биохимических реакций, идущих в эмбрионе [7]. В данной работе рассматривается нетриггерная модель химической реакции.

Заметим, что предложенная математическая модель может также описывать распределение двух взаимодействующих между собой видов в одномерном пространстве.

Рассмотрим модель химической реакции, предложенную в работе [4]:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = A + X^2 Y - (B + 1) X + D_x \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = BX - X^2Y + D_y \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2}.$$

Здесь X и Y — концентрации двух реагирующих веществ, D_x и D_y — их коэффициенты диффузии, A и B — параметры реакции, ξ — пространственная переменная.

Рассмотрим реактор с непроницаемыми стенками длины l . Тогда граничные условия можно записать в виде

$$\frac{\partial X}{\partial \xi}(0, t) = \frac{\partial X}{\partial \xi}(l, t) = \frac{\partial Y}{\partial \xi}(0, t) = \frac{\partial Y}{\partial \xi}(l, t) = 0, \quad (2)$$

либо кольцевой реактор:

$$\begin{aligned} X(0, t) &= X(l, t), & Y(0, t) &= Y(l, t), \\ \frac{\partial X}{\partial \xi}(0, t) &= \frac{\partial X}{\partial \xi}(l, t), & \frac{\partial Y}{\partial \xi}(0, t) &= \frac{\partial Y}{\partial \xi}(l, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Для достаточного малого объема реактора, для которого время усреднения по объему за счет диффузии много меньше характерного времени реакции, процесс будет протекать во всех точках объема одинаково во времени. Такой процесс будет описываться системой обыкновенных дифференциальных уравнений (4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} &= A + X^2Y - (B + 1)X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} &= BX - X^2Y. \end{aligned} \quad (4)$$

Система уравнений (4) имеет одну особую точку с координатами $X_0 = A$, $Y_0 = B/A$, устойчивую при $B < 1 + A^2$. Если $B > 1 + A^2$, то особая точка X_0 , Y_0 становится неустойчивой, а у системы (4) появляется устойчивый предельный цикл.

Тривиальным решением системы уравнений (1) является стационарное пространственно однородное решение:

$$X = A \equiv \text{const}, \quad Y = B/A \equiv \text{const}. \quad (5)$$

Исследуем это решение на устойчивость. Для этого линеаризируем систему уравнений (1) около решения (5), получим линейное уравнение в частных производных для малых отклонений $x = X - A$, $y = Y - \frac{B}{A}$. Решение этой системы уравнений представим в виде $x = C_1 \exp(\lambda t + ik\xi)$, $y = C_2 \exp(\lambda t + ik\xi)$. Тогда λ и k связаны уравнением $\lambda^2 + \lambda[A^2 + 1 - B + (D_x + D_y)k^2] + (1 - B + D_x k^2)(A^2 + D_y k^2) + A^2 B = 0$. (6)

Нас интересуют нарастающие решения, т. е. такие решения, для которых $\text{Re} \lambda > 0$. Наиболее характерные зависимости $\text{Re} \lambda$ от k^2 приведены на рис. 1. На графиках можно выделить три области: 1 — оба корня имеют положительную действительную часть, 2 — один корень имеет положительную, а другой отрицательную действительные части, 3 — оба корня имеют отрицательные действительные части. Малые возмущения с волновыми числами k из области 2 могут привести к образованию ДС [4].

Область 2 существует, если выполнены следующие условия:

$$B \geq 1; \quad D_x \leq D_{x\max} = D_y \left(\frac{1 - \sqrt{B}}{A} \right)^2, \quad (7)$$

а границы области определяются выражением

$$k_{1,2}^2 = \frac{1}{2D_x D_y} \{ [(B-1)D_y - D_x A^2] \pm \sqrt{[(B-1)D_y - D_x A^2]^2 - 4A^2 D_x D_y} \}. \quad (8)$$

Заметим, что при $D_x = 0$ $k_1^2 \rightarrow \infty$, а при $D_x = D_{x\max}$ $k_1^2 = k_2^2$ и область 2 стягивается в точку.

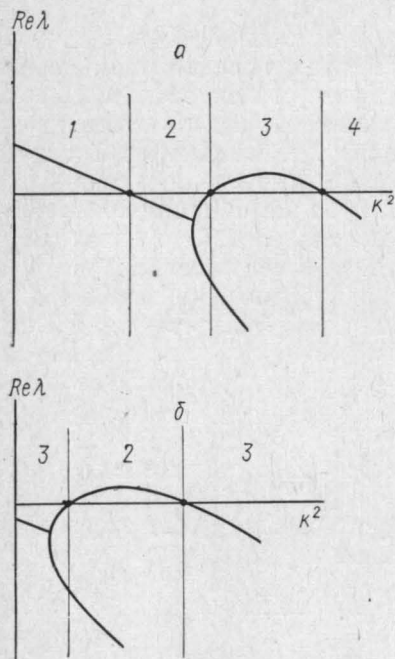


Рис. 1

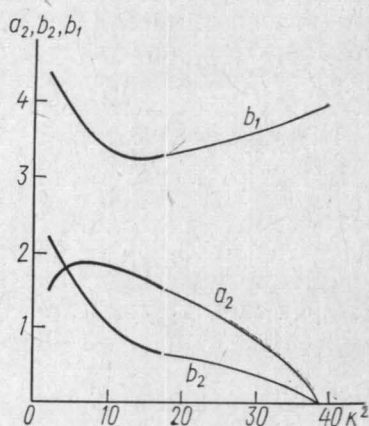


Рис. 2

Будем искать решение системы уравнений (1) в виде

$$\begin{aligned} X &= a_1 + a_2 \cos k\xi, \\ Y &= b_1 + b_2 \cos k\xi + c_2 \sin k\xi. \end{aligned} \quad (9)$$

Подставляя (9) в (1) и пренебрегая высшими пространственными модами, получим

$$\begin{aligned} a_1 &= A, \quad c_2 = 0, \\ b_1 &= \frac{A \left[B + \frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} a_2^2 \right]}{A^2 + \frac{1}{2} a_2^2}, \quad b_2 = \frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} a_2 \end{aligned} \quad (10)$$

и

$$a_2^2 = \frac{4}{3} \frac{k^2 D_y}{1 + k^2 D_x} \left\{ \left[\frac{3}{4} A^2 \frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} - \frac{1}{2} (1 + B + k^2 D_x) \right] + \right. \\ \left. + \sqrt{\left[\frac{3}{4} A^2 \frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} - \frac{1}{2} (1 + B + k^2 D_x) \right]^2 - \right.} \\ \left. - \frac{3}{2} A^2 \frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} \left[\frac{1 + k^2 D_x}{k^2 D_y} A^2 + 1 + k^2 D_x - B \right] \right\}. \quad (11)$$

Исследование выражения (11) показывает, что $a_2^2 \geq 0$, если волновое число k принадлежит области 2, иными словами, ДС в виде (9) существуют лишь для тех k , для которых выполнены условия самовозбуждения.

На рис. 2 приведены характерные зависимости a_2 , b_2 и b_1 от волнового числа k^2 . Для всей области параметров, определяемой неравенствами (7), полученные ДС обладают двумя особенностями. Как следует из (10), a_2 и b_2 имеют противоположные знаки, или концентрации веществ X и Y находятся в «противофазе», т. е. максимуму X соответствует минимум Y и наоборот. Вторая особенность заключается в том, что амплитуды ДС (a_2 и b_2) на правой границе области самовозбуждения $k=k_1$ нарастают плавно от нулевых значений. Это означает, что для волновых чисел, близких к k_1 , неоднородное решение в виде (9) не сильно отличается от стационарного однородного решения (5). На другой границе области самовозбуждения ($k=k_2$) амплитуды ДС скачком принимают далекие от нуля значения.

Граничным условиям (2) или (3) будут удовлетворять не все полученные решения, а лишь те, для которых $k = \frac{\pi n}{l}$, где n — любые натуральные числа для граничных условий (2) и четные для граничных условий (3).

Исследуем полученные решения на устойчивость; для этого линеаризуя систему уравнений (1) около решения (9), получим

$$\frac{\partial x}{\partial t} = A(\xi) x + B(\xi) y + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -(1 + A(\xi)) x - B(\xi) y + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2},$$

где

$$A(\xi) = (2Ab_1 + a_2b_2 - B - 1) + 2(Ab_2 + a_2b_1) \cos k\xi + a_2b_2 \cos 2k\xi,$$

$$B(\xi) = \left(A^2 + \frac{1}{2} a_2^2 \right) + 2Aa_2 \cos k\xi + \frac{1}{2} a_2^2 \cos 2k\xi.$$

Решение системы (12) с граничными условиями (2) или (3) можно искать в виде ряда Фурье

$$x = \sum_{i=0}^n x_i(t) \cos ik\xi; \quad y = \sum_{i=0}^n y_i(t) \cos ik\xi. \quad (13)$$

Подставляя решение в виде (13) в (12), получим систему $2n$ линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Исследование этой системы уравнений на устойчивость сводится к исследованию знаков действительных частей собственных чисел соответствующей характеристической матрицы порядка $2n$.

В данной работе мы ограничимся $n=1$, или двумя первыми слагаемыми в суммах (13). Это означает, что мы исследуем устойчивость лишь к некоторым возмущениям, а именно, к возмущениям с той же длиной волны, что и длина волны самого решения.

Конечно, такое исследование нельзя считать полным, однако даже такое рассмотрение позволяет сделать ряд качественных выводов. В таблице приведены значения волновых чисел $k_{3,4}^2$, при которых решения вида (9) становятся неустойчивыми к возмущениям вида (13) с $n=1$. Устойчивыми являются решения с волновыми числами из интервала $k_3 < k < k_4$. Здесь $A=2$, $D_y=0,41$.

B	D_{max}	D_x	k_1^2	k_2^2	k_3^2	k_4^2
4,8	0,145	0,029	118,1	2,84	2,84	118,1
		0,058	52,4	3,2	3,2	52,4
		0,087	30,1	3,72	3,72	30,1
		0,116	18,3	4,57	4,57	18,3
5,2	0,168	0,034	112,6	2,58	2,58	75
		0,067	49,8	2,91	2,91	38
		0,101	28,5	3,39	3,39	24
		0,134	17,3	4,2	4,2	15
8,0	0,343	0,069	90,8	1,57	1,57	18
		0,134	39,5	1,8	1,8	15
		0,206	22,1	2,14	2,5	9
		0,274	13,05	2,73	—	—

Из таблицы следует, что область устойчивости сужается при увеличении параметра B . Этот результат легко понять, если вспомнить, что в системе уравнений (1) кроме диссипативных структур возможны синфазные колебания всех точек пространства с амплитудой предельного цикла соответствующей, точечной системе (4). При увеличении коэффициента B увеличивается инкремент нарастания для точечной системы, а следовательно, и вероятность возбуждения синфазных колебаний.

Как уже было сказано, проведенное исследование на устойчивость нельзя считать полным. Поэтому мы решали уравнение (1) на ЦВМ

методом явной сетки. Решение проводилось для двух наборов параметров.

1. $A=2$, $B=5,2$; $D_x=0,375$; $D_y=0,41$; $l=5,8$. Тогда $k_1^2=18,6$; $k_2^2=4,2$. Граничным условиям (2) (линия) удовлетворяют четыре диссипативные структуры с волновыми числами $k^2=4,8$; $7,5$; $10,8$ и $14,7$. Устойчивыми из них оказались три решения $k^2=4,8$; $7,5$ и $10,8$.

2. $A=2$, $B=8$, $D_x=0,125$; $D_y=0,41$; $l=5,8$. Тогда $k_1^2=44,4$; $k_2^2=1,75$. Граничным условиям (3) (кольцо) удовлетворяют четыре решения с волновыми числами: $k^2=4,8$; $10,8$; $19,2$ и 30 . Устойчивыми из них являются лишь два $k^2=10,8$ и $19,2$.

Проведенные расчеты показывают, что диссипативные структуры с длинами волн, близкими к границе их самовозбуждения, как правило, неустойчивы.

В заключение выражаю признательность Ю. М. Романовскому, Д. С. Чернавскому и В. В. Алексееву за полезные обсуждения результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Prigogine J., Lefever R. J. Chem. Phys., **48**, 1695, 1968.
2. Wainberg A. M. Bull. Math. Biophys., **1**, 19, 1938.
3. Rashevsky N. Bull. Math. Biophys., **10**, 159, 1948.
4. Turing A. M. Philos. Trans. Roy. Soc., **B237**, 37, 1952.
5. Романовский Ю. М., Сидорова Г. А. В сб.: «Колебательные процессы в биологических и химических системах». М., 1967.
6. Prigogine J., Lefever R., Joldbeter A. Nature, **223**, 913, 1969.
7. Григоров Л. Н., Полякова М. С., Чернавский Д. С. «Молекулярная биология», **1**, 410, 1967.

Поступила в редакцию
11.9 1972 г.

Кафедра общей физики
для мехмата