

ция — подразделение системы на «отсеки», разделенные мембранами. Система гетерогенна не только химически, но и пространственно.

3. В химических системах живой природы нелинейные химические реакции сопряжены как с транспортом вещества, так и с механическими и электрическими процессами.

4. Во многих химико-биологических процессах приходится иметь дело с малыми числами молекул. Само понятие концентрации имеет в этих случаях ограниченную применимость, и в качестве динамических переменных следует вводить вероятности тех или иных состояний молекул.

Математические модели биологических процессов зачастую весьма сложны, содержат много переменных и описывают многостадийное поведение. Имеются, однако, возможности упрощенного рассмотрения, состоящего в сведении большой совокупности уравнений к двум-трем нелинейным уравнениям.

Пусть нам удалось после ряда преобразований и выбора соответствующих масштабов расположить систему нелинейных уравнений (15.6) по степеням малого параметра $\varepsilon \ll 1$ при производной

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \dot{x}_i &= \mathcal{F}_i(x_1, \dots, x_N), \quad i = 1, 2, \dots, l, \\ \varepsilon \dot{x}_j &= \mathcal{F}_j(x_1, \dots, x_N), \quad j = l+1, \dots, l+m, \\ \dot{x}_k &= \mathcal{F}_k(x_1, \dots, x_N), \quad k = l+m+1, \dots, N. \end{aligned} \quad (15.20)$$

Коэффициенты ε^2 и ε определяют скорости изменений переменных x . В самом деле, систему (15.20) можно переписать в виде

$$\dot{x}_i = \tau_1^{-1} \mathcal{F}_i, \quad \dot{x}_j = \tau_2^{-1} \mathcal{F}_j, \quad \dot{x}_k = \tau_3^{-1} \mathcal{F}_k,$$

где $\tau_1 = \varepsilon^2$, $\tau_2 = \varepsilon$, $\tau_3 = 1$, т. е. $\tau_1 \ll \tau_2 \ll \tau_3$. Если существенно поведение системы как на малых отрезках времени порядка τ_1 , так и на больших порядка τ_3 , то приходится изучать систему в целом. В других случаях ситуация иная. Так, если важны явления, происходящие за средние времена порядка τ_2 , то система упрощается. В самом деле, за эти времена «медленные» переменные x_k не успевают измениться, и можно заменить их начальными постоянными значениями. Напротив, «быстрые» переменные x_i успевают достичь своих стационарных значений, если таковые существуют. Значит, переменные x_i можно заменить их стационарными значениями. Таким образом, из N уравнений остаются лишь m уравнений. Мы не раз воспользуемся таким способом упрощения в последующем изложении.

§ 15.3. Модели Лотка и Вольтерра

Физико-математическое моделирование биологических процессов началось с модели автокаталитической химической реакции, предложенной Лотка (1920), и модели «хищник — жертва», предложенной Вольтерра (1930). Эти модели имеют много общего.

Они являются одними из простейших моделей, описывающих поведение нелинейных систем, и в то же время существенны для ряда химических и биологических проблем. Мы начнем с рассмотрения этих моделей, дающих необходимые нам примеры нелинейной динамики.

Лотка рассмотрел систему реакций



Суммарная реакция есть $A \rightleftharpoons E$. Стадия (II) автокаталитическая. Вещество А находится в избытке, поэтому реакция (I) нулевого порядка.

Общее сродство, отвечающее суммарной реакции (ср. с. 310),

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_I + \mathcal{A}_{II} + \mathcal{A}_{III} = RT \ln \frac{k_1 k_2 k_3 [A]}{k_{-1} k_{-2} k_{-3} [E]}. \quad (15.21)$$

Вблизи равновесия система линейна:

$$v_I^0 = k_1 \frac{\mathcal{A}_I}{RT}, \quad v_{II}^0 = k_2 X_{eq} Y_{eq} \frac{\mathcal{A}_{II}}{RT}, \quad v_{III}^0 = k_3 Y_{eq} \frac{\mathcal{A}_{III}}{RT}. \quad (15.22)$$

Условие устойчивости имеет вид

$$k_1 (\delta \mathcal{A}_I)^2 + k_2 X_{eq} Y_{eq} (\delta \mathcal{A}_{II})^2 + k_3 Y_{eq} (\delta \mathcal{A}_{III})^2 \geq 0. \quad (15.23)$$

Вблизи равновесия оно соблюдается (ср. с. 324). Вдали от равновесия можно пренебречь обратными реакциями, т. е. положить $k_{-1} = k_{-2} = k_{-3} = 0$. Следовательно, $\mathcal{A} \rightarrow \infty$. Кинетические уравнения нелинейны и асимметричны:

$$\dot{X} = k_1 - k_2 XY, \quad \dot{Y} = k_2 XY - k_3 Y, \quad \dot{E} = k_3 Y. \quad (15.24)$$

Единственное стационарное решение отвечает условию $\dot{X} = \dot{Y} = \dot{E} = 0$. Имеем

$$X^0 = k_3/k_2, \quad Y^0 = k_1/k_3.$$

Как поведет себя система вдали от равновесия? Рассмотрим это на основе модели «хищник — жертва», исследованной Вольфтера.

В некотором замкнутом районе живут хищники и их жертвы, скажем, рыси и зайцы. Рыси питаются только зайцами, зайцы питаются растительной пищей, имеющейся в избытке. Число жертв X , число хищников Y . Поведение популяций во времени описывается уравнениями

$$\dot{X} = k_1 X - k XY, \quad \dot{Y} = k' XY - k_2 Y. \quad (15.25)$$

Константа k_1 характеризует размножение жертв, k — их убыль вследствие встреч с хищниками, k' — размножение хищников, для которого необходимо питание хищников, т. е. встречи с жертвами, k_2 — вымирание хищников. Уравнения (15.25) в основных чертах сходны с уравнениями (15.24). Найдем стационарные значения переменных из уравнений (15.25) при $X = Y = 0$:

$$X^0 = k_2/k', \quad Y^0 = k_1/k.$$

Представим X и Y в виде

$$X = X^0 e^\alpha, \quad Y = Y^0 e^\beta, \quad (15.26)$$

где $\alpha = \ln(X/X^0)$ и $\beta = \ln(Y/Y^0)$ являются мерами отклонения X и Y от стационарного состояния, в котором $\alpha = \beta = 0$. Уравнения (15.25) перепишутся в виде

$$\frac{1}{k} \dot{\alpha} = Y^0 (1 - e^\beta), \quad \frac{1}{k'} \dot{\beta} = -X^0 (1 - e^\alpha). \quad (15.27)$$

Умножим первое уравнение на $X^0(1 - e^\alpha)$, второе — на $Y^0(1 - e^\beta)$ и сложим:

$$\frac{1}{k} X^0 \dot{\alpha} (1 - e^\alpha) + \frac{1}{k'} Y^0 \dot{\beta} (1 - e^\beta) = 0$$

или

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{k} X^0 (e^\alpha - \alpha) + \frac{1}{k'} Y^0 (e^\beta - \beta) \right] = 0,$$

т. е.

$$\frac{1}{k} X^0 (e^\alpha - \alpha) + \frac{1}{k'} Y^0 (e^\beta - \beta) = K = \text{const}. \quad (15.28)$$

Величина K есть постоянная движения. Оба члена в K положительны, так как если $\alpha > 0$, то $e^\alpha > \alpha$, а если $\alpha < 0$, то $e^\alpha > 0$.

Введем обозначения $e^\alpha = \varphi$, $e^\beta = \psi$. Умножив обе части (15.28) на kk' , имеем, так как $k'X^0 = k_2$, $kY^0 = k_1$,

$$k_2(\varphi - \ln \varphi) + k_1(\psi - \ln \psi) = Kkk' = \text{const}.$$

Поделив на k_1k_2 , находим

$$\frac{1}{k_1} (\varphi - \ln \varphi) + \frac{1}{k_2} (\psi - \ln \psi) = K \frac{kk'}{k_1k_2} = \text{const}.$$

Потенцируем:

$$(\varphi e^{-\varphi})^{1/k_1} (\psi e^{-\psi})^{1/k_2} = UV = \text{const}. \quad (15.29)$$

Уравнение $UV = \text{const}$ есть уравнение гиперболы. Ее график показан на рис. 15.8, а. На рис. 15.8, б и в показано поведение функций $V(\psi)$ и $U(\varphi)$. Эти кривые имеют максимумы. Зависимость φ от ψ , следующая из (15.29), показана на рис. 15.8, г. Максимумам U и V отвечают точки A и B на гиперболе. При движении между этими двумя предельными точками на плоскости φ, ψ описывается цикл, вид которого зависит от начальных условий. Стационарному состоянию отвечают точки A и B на ги-

перболе, точки максимумов M_1 и M_2 на кривых $U(\varphi)$ и $V(\varphi)$ и особая точка типа центра на плоскости φ, ψ .

Определим поведение системы вблизи особой точки. Линеаризуем систему (15.25) — ищем ее решение в виде

$$X = X^0 + xe^{\lambda t}, \quad Y = Y^0 + ye^{\lambda t}, \quad (15.30)$$

причем $|x|, |y| \ll X^0, Y^0$. Пренебрегая членами, нелинейными относительно x, y , получаем

$$\lambda x + \frac{kk_2}{k'} y = 0, \quad -\frac{k'k_1}{k} x + \lambda y = 0. \quad (15.31)$$

Условие совместности этих двух уравнений есть характеристическое уравнение

$$\lambda^2 + k_1 k_2 = 0 \quad (15.32)$$

и $\lambda = i\omega$ — мнимая величина. Частота колебаний равна

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k_1 k_2}. \quad (15.33)$$

Она не зависит от констант k, k' . Напротив, амплитуды колеба-

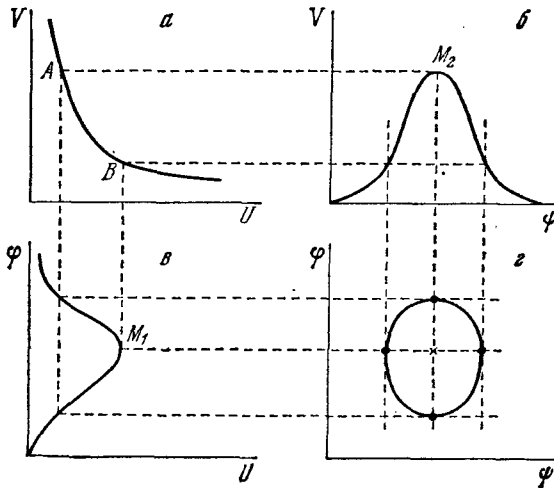


Рис. 15.8. Построение интегральных кривых для модели Вольтерра — Лотка. Объяснение в тексте

ний зависят от всех четырех констант. Из (15.31) и (15.32) следует

$$\frac{|x|}{|y|} = \frac{k}{k'} \sqrt{\frac{k_2}{k_1}}. \quad (15.34)$$

Таким образом, популяции X и Y испытывают периодические колебания одинаковой частоты, смещенные по фазе. Для сравнения приведем рис. 15.9, на котором показана динамика популя-

ций зайцев и рысей в Канаде за 1845—1935 гг. по данным меховой компании. Такое поведение следует и из наглядных соображений. Допустим, что зайцев вначале было много. Тогда рыси размножились, и число зайцев уменьшилось. Это, в свою очередь, вызвало уменьшение числа зайцев, за ним последовало

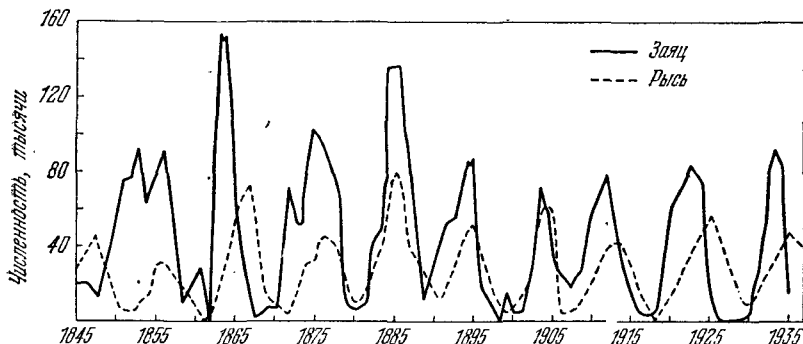


Рис. 15.9. Динамика популяций зайцев и рысей в Канаде за 1845—1935 гг.

уменьшение числа рысей, зайцы вновь размножились и т. д. В простых случаях результаты применения математической модели качественно очевидны. Однако без анализа нельзя установить ни частоты, ни амплитуды колебаний X и Y . В более сложных случаях математическая модель раскрывает особенности, заранее вовсе не очевидные.

Мы исследовали поведение консервативной системы. В действительности популяции видов могут расти лишь до некоторого предела, до значений $X^{(m)}$, $Y^{(m)}$, отвечающих насыщению. Предел размножения жертв выражается соотношением (Ферхулст)

$$\dot{X} = k_1 X \frac{X^{(m)} - X}{X^{(m)}} - kXY. \quad (15.35)$$

По-прежнему

$$\dot{Y} = k'XY - k_2 Y. \quad (15.36)$$

Система (15.35), (15.36) более не консервативна и не имеет постоянной движения.

Уравнения типа (15.25) обобщаются на любое число взаимодействующих популяций. Исследование соответствующих систем важно для экологии.

Уравнения автокатализа Лотка, сходные с уравнениями Вольтерра, также приводят к периодическому поведению. Мы видим, что нелинейные асимметрические системы способны к поведению, упорядоченному во времени.

Мы видели, что для химических процессов

$$d_X \sigma = \frac{1}{T} \sum_i v_i d\mathcal{A}_i \leq 0 \quad (15.37)$$

(ср. (15.3)). Вблизи стационарного состояния

$$T\delta_X\sigma = \sum_i \delta v_i d(\delta\mathcal{A}_i) \leq 0. \quad (15.38)$$

Разлагая δv_i в ряд по $\delta\mathcal{A}_i$, получаем

$$\delta v_i = \sum_j L'_{ij} \delta\mathcal{A}_j, \quad (15.39)$$

где $L'_{ij} = (\partial v_i / \partial \mathcal{A}_j)_0$ — производные, взятые для стационарного состояния. Вообще говоря, L'_{ij} может содержать как симметричную, так и антисимметричную часть. В условиях линейности, т. е. вблизи равновесия, коэффициенты L'_{ij} совпадают с коэффициентами Онзагера и антисимметричные их части равны нулю. Вдали от равновесия это также возможно. Тогда

$$Td_X\sigma = d\Psi \leq 0, \quad (15.40)$$

где

$$\Psi = 1/2 \sum_{i,j} L'_{ij} \delta\mathcal{A}_i \delta\mathcal{A}_j \quad (15.41)$$

есть кинетический потенциал. Однако если антисимметричные части L'_{ij} отличны от нуля, то в общем случае кинетический потенциал не существует. Допустим, что два химических процесса описываются антисимметричной матрицей L'_{ij} , т. е.

$$L'_{11} = L'_{22} = 0, \quad L'_{12} = -L'_{21} = -L'.$$

Тогда

$$T\delta_X\sigma = L'(\delta\mathcal{A}_2 d(\delta\mathcal{A}_1) - \delta\mathcal{A}_1 d(\delta\mathcal{A}_2)) \leq 0. \quad (15.42)$$

Такая система вращается вокруг стационарного состояния, не попадая в

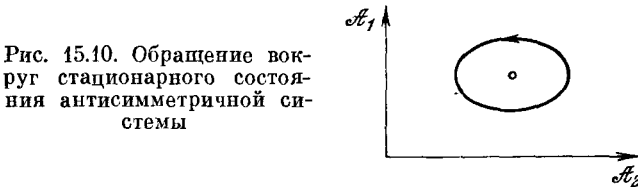


Рис. 15.10. Обращение вокруг стационарного состояния антисимметричной системы

него. Фазовая диаграмма имеет вид, показанный на рис. 15.10; точка, отвечающая стационарному состоянию, есть центр. Вводя полярные координаты r и φ на плоскости $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$, имеем

$$Td_X\sigma = -L'r^2 d\varphi \leq 0. \quad (15.43)$$

Но функция $\Psi = L'r^2\varphi$ не является потенциалом — она возрастает на $2\pi L'r^2$ при каждом обороте.

Именно с такой ситуацией мы встретились при рассмотрении системы Лотка — Вольтерра.

§ 15.4. Автокаталитические системы

Рассмотренная нами химическая автокаталитическая система Лотка является колебательной, она характеризуется особой точкой типа центра. Обратимся к другим, более сложным точечным автокаталитическим химическим системам. Исследуем так назы-