

2. Самоорганизация и образование структур. Синергетика

1. Диссипативные структуры

Рассмотрим распределенные системы, в которых в результате развития неустойчивости в однородной диссипативной среде могут возникать устойчивые пространственно-неоднородные структуры. Такие структуры называются диссипативными. Основы их теории заложил в 1952 году Алан М. Тьюринг, а сам термин предложил И.Р.Пригожин.

Общим условием развития процессов самоорганизации (самопроизвольного возникновения волн и структур) является появление неустойчивости, возникающее, если отклонение от состояния равновесия превышает критическое.

Диссипативная структура поддерживается за счет постоянного притока энергии и вещества – открытые системы.

Уравнения, описывающие процессы в системе, должны быть **нелинейными**.

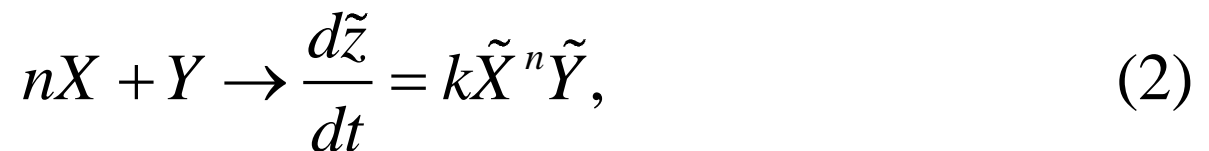
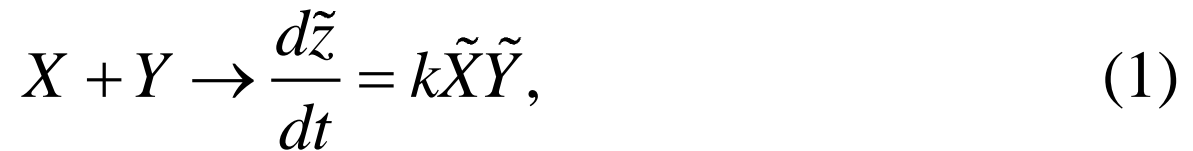
Процессы в среде должны протекать **согласованно**.

Синергетика изучает процессы образования структур в сложных самоорганизующихся системах.

2. Модель брусселлятора.

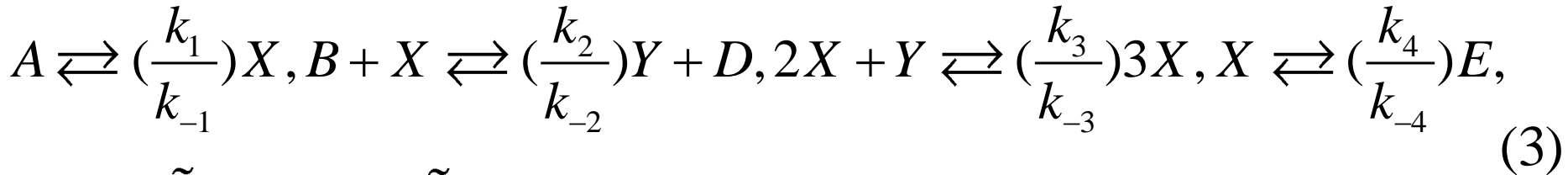
Базовая модель синергетики, предложенная в 1968 году Пригожиным и Лефевром. Позволяет выявить условия возникновения типов самоорганизации в химических и биологических системах. Представляет собой схему гипотетических химических реакций, происходящих в тонком и длинном (одномерном) сосуде-реакторе длиной L .

Закон действующих масс:



где k - постоянная реакции, $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ – концентрации.

Схемы реакций:



где $\tilde{A} = const, \tilde{B} = const$, вещества X и Y остаются в реакторе, вещества D и E удаляются (система открытая),

$$k_{-i} \ll k_i, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Из формул (1)-(3) следует:

$$\tilde{X}_t = k_1 \tilde{A} - (k_2 \tilde{B} + k_4) \tilde{X} + k_3 \tilde{X}^2 \tilde{Y} + \bar{D}_1 \tilde{X}_{xx}, \quad (4)$$

$$\tilde{Y}_t = k_2 \tilde{B} \tilde{X} - k_3 \tilde{X}^2 \tilde{Y} + \bar{D}_2 \tilde{Y}_{xx}, \quad (5)$$

где \bar{D}_1 и \bar{D}_2 – коэффициенты диффузии.

Замена переменных:

$$k_4 t \rightarrow t, X = \left(\frac{k_3}{k_4} \right)^{\frac{1}{2}} \tilde{X}, Y = \left(\frac{k_3}{k_4} \right)^{\frac{1}{2}} \tilde{Y}, A = \left(\frac{k_1^2 k_3}{k_4^3} \right)^{\frac{1}{2}} \tilde{A},$$
$$B = \tilde{B} \frac{k_2}{k_4}, \bar{\bar{D}}_1 = \frac{\bar{D}_1}{k_4}, \bar{\bar{D}}_2 = \frac{\bar{D}_2}{k_4}. \quad (6)$$

Из формул (4)-(6) получаем:

$$X_t = A - (B + 1)X + X^2 Y + \bar{\bar{D}}_1 X_{xx}, \quad (7)$$

$$Y_t = BX - X^2 Y + \bar{\bar{D}}_2 Y_{xx}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0, \quad (8)$$

$$X(x, 0) = X_0(x), \quad Y(x, 0) = Y_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (9)$$

$$X_x(0, t) = X_x(L, t) = 0, \quad Y_x(0, t) = Y_x(L, t) = 0. \quad (10)$$

Начально-краевая задача (7)-(10) является моделью брюсселятора.

Исследуем стационарные однородные по пространству решения.

Из формул (7) и (8) следует система:

$$A - (B + 1)X + X^2Y = 0, \quad (11)$$

$$BX - X^2Y = 0. \quad (12)$$

Единственное решение имеет вид:

$$X = A, \quad Y = \frac{B}{A}. \quad (13)$$

Будем менять $X_0(x), Y_0(x), B$. **Если B невелико**, то независимо от начальных данных через определённое время установятся концентрации:

$$X(x, t) = A, \quad Y(x, t) = \frac{B}{A}. \quad (14)$$

Устойчивые стационарные решения, на которые независимо от начальных данных выходят распределения параметров при небольших внешних воздействиях, называется **термодинамической ветвью**.

Зафиксируем $X_0(x)$ и $Y_0(x)$ и будем увеличивать B . Начиная с критического B_c происходит выход на немонотонные стационарные распределения концентраций, возникающие **вне термодинамической ветви** и названные Пригожиным **диссипативными структурами**.

Стационарные решения (13) удовлетворяют задаче при любом B . При $B > B_c$ появляется несколько нестационарных решений, то есть происходит **ветвление решений или бифуркация**.

Зафиксируем $B > B_c$ и будем менять $X_0(x), Y_0(x)$. При некоторых значениях B с разных классов начальных данных в одной и той же нелинейной среде происходит выход на разные стационары.

Причиной возникновения структур являются внутренние свойства системы, а поводом – вносимые флуктуации.

Для учёта флуктуаций в правые части (7) и (8) добавляют случайные функции.

Резонансные воздействия на систему в окрестности B_c : слабые воздействия вызывают сильный эффект.

Определение B_c . Линеаризуем уравнения (7), (8):

$$X = A + \bar{X}, \quad Y = \frac{B}{A} + \bar{Y}, \quad (15)$$

где $|\bar{X}| \leq A$, $|\bar{Y}| \leq \frac{B}{A}$.

Подставим (15) и (7), (8) и отбросим члены второго порядка и выше:

$$\begin{cases} \bar{X}_t = (B-1)\bar{X} + A^2\bar{Y} + \bar{D}_1\bar{X}_{xx}, & (16) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{Y}_t = B\bar{X} - A^2\bar{Y} + \bar{D}_2\bar{Y}_{xx}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0, & (17) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{X}(x,0) = X_0(x) - A, \quad \bar{Y}(x,0) = Y_0(x) - \frac{B}{A}, \quad 0 \leq x \leq L, & (18) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{X}_x(0,t) = \bar{X}_x(L,t) = 0, \quad \bar{Y}_x(0,t) = \bar{Y}_x(L,t) = 0, \quad t \geq 0. & (19) \end{cases}$$

Найдём частные решения вида $g(t) \cdot f(x)$

$$\bar{X}_m = p_m e^{\lambda_m t} \cos \frac{\pi m x}{L},$$

$$\bar{Y}_m = q_m e^{\lambda_m t} \cos \frac{\pi m x}{L}, m = 0, 1, 2, \dots \quad (20)$$

Для определения $\lambda = \lambda_m$ из (16), (17), (20) получаем уравнение:

$$\lambda^2 + \lambda \left[A^2 - B + 1 + (\bar{\bar{D}}_1 + \bar{\bar{D}}_2) \left(\frac{m^2 \pi^2}{L^2} \right) \right] + \left[-A^2 B - \left(A^2 + \bar{\bar{D}}_2 \frac{m^2 \pi^2}{L^2} \right) \left(B - 1 - \bar{\bar{D}}_1 \frac{m^2 \pi^2}{L^2} \right) \right] = 0, m=0, 1, \dots \quad (21)$$

Если $\operatorname{Re} \lambda_{m_1} < 0, \operatorname{Re} \lambda_{m_2} < 0$ для всех m , то термодинамическая ветвь (14) устойчива (малые B).

Если при $B = B_c$ $\lambda_{m_1} = 0, \lambda_{m_2} < 0$, то при $B > B_c$ возникают структуры.

Если при $B = B_c$ для некоторого m $\operatorname{Re} \lambda_{m_1} = \operatorname{Re} \lambda_{m_2} = 0$, $\operatorname{Im} \lambda_{m_1} = -\operatorname{Im} \lambda_{m_2}$, то функции \bar{X}_m и \bar{Y}_m периодические и в системе возникают колебания.

При этом обычно $\bar{D}_1 \approx \bar{D}_2$

Модель брюсселятора отражает общие черты многих систем, где возникают структуры и возможно явление самоорганизации:

- 1) Система является термодинамически открытой, то есть в ней возможен обмен энергией, веществом и т.д. с окружающей средой.**
- 2) Макроскопические процессы происходят согласованно (кооперативно, когерентно). В рассмотренном нами случае такое согласование обеспечивают диффузионные процессы.**
- 3) Отклонения от равновесия превышают критическое значение то есть рассматриваются состояния, лежащие вне термодинамической ветви.**
- 4) Процессы рассматриваются в таком диапазоне параметров, когда для описания этих процессов необходимы нелинейные математические модели.**

Отметим, что образование диссипативных структур лежит в основе дифференцирования тканей при морфогенезе.