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 **нелинйными.**

Процессы в среде должны протекать **согласованно**

Синергетика изучает процессы образования структур в сложных самоорганизующихся системах.

2. Модель брюсселятора.

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:

$$X + Y \to \frac{d\tilde{z}}{dt} = k\tilde{X}\tilde{Y}, \qquad (1)$$

$$nX + Y \to \frac{d\tilde{z}}{dt} = k\tilde{X}^{n}\tilde{Y}, \qquad (2)$$

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

Схема реакции:

$$A \rightleftarrows (\frac{k_1}{k_{-1}}) X, B + X \rightleftarrows (\frac{k_2}{k_{-2}}) Y + D, 2X + Y \rightleftarrows (\frac{k_3}{k_{-3}}) 3X, X \rightleftarrows (\frac{k_4}{k_{-4}}) E, \tag{3}$$

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

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

Из формул (1)-(3) следует:

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

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

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

Замена переменных:

$$k_4 t \to t,\ X = \left(\frac{k_3}{k_4}\right)^{\frac{1}{2}} \tilde{X},\ Y = \left(\frac{k_3}{k_4}\right)^{\frac{1}{2}} \tilde{Y},\ A = \left(\frac{k_1^2 k_3}{k_4^3}\right)\tilde{A},$$

$$B = \tilde{B}\frac{k_2}{k_4},\ \bar{\bar{D}}_1 = \frac{\bar{D}_1}{k_4},\ \bar{\bar{D}}_2 = \frac{\bar{D}_2}{k_4}. \qquad (6)$$

Из формул (4)-(6) получаем:

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

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

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

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

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

Исследуем стационарные однородные по пространству решения.

Из формул (7) и (8) следует система:

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

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

Единственное решение имеет вид:

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

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

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

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):

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

где $\left|\bar{X}\right| \le A, \quad \left|\bar{Y}\right| \le \dfrac{B}{A}.$

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

$$\begin{cases} \bar{X}_t = \left(B-1\right)\bar{X} + A^2\bar{Y} + \bar{\bar{D}}_1\bar{X}_{xx}, & (16) \\ \bar{Y}_t = -B\bar{X} - A^2\bar{Y} + \bar{\bar{D}}_2\bar{Y}_{xx}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0, & (17) \\ \bar{X}\left(x,0\right) = X_0\left(x\right) - A, \ \bar{Y}\left(x,0\right) = Y_0\left(x\right) - \dfrac{B}{A}, \ 0 \le x \le L, & (18) \\ \bar{X}_x\left(0,t\right) = \bar{X}_x\left(L,t\right) = 0, \ \bar{Y}_x\left(0,t\right) = \bar{Y}_x\left(L,t\right) = 0, \ t \ge 0. & (19) \end{cases}$$

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

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

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

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

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

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

Если $\mathrm{Re}\,\lambda_{m_1} < 0, \mathrm{Re}\,\lambda_{m_2} < 0$ 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 $\mathrm{Re}\,\lambda_{m_1} = \mathrm{Re}\,\lambda_{m_2} = 0,$ $\mathrm{Im}\,\lambda_{m_1} = -\mathrm{Im}\,\lambda_{m_2}$, то функции $\bar{X}_m$ и $\bar{Y}_m$ периодические и в системе возникают колебания.

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

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.