УДК 621.391 : 612.82

А. М. Молчанов

Пущино Московской обл.

МЕХАНОХИМИЯ
(феноменологический аспект)

Предложена система уравнений, описывающая, по мнению автора, основные кинетические режимы, возникающие при взаимодействии механических и химических компонент. Намечены пути изучения этих сложных режимов.

История механики состоит из трех главных этапов. Начальный этап (похожий на современное состояние проблемы биологической подвижности) характеризовался разнообразием задач и пестротой методов их решения. Во времена Эйлера наступила эра вариационных принципов, которым придавался философский, мировоззренческий смысл. Однако постепенно выяснилось, что максимум функционала реализуют только очень простые (чаще всего просто положения равновесия) движения. Интересные (и сложные) движения соответствуют обычно стационарным * (а не экстремальным) значениям функционала, задающего вариационный принцип.

Жгучий (но несколько «поспешный») интерес к вариационной тематике остыл и наступил завершающий этап действительно глубокого синтеза. Был создан гамильтонов формализм и показано, что вариационный подход есть частный случай гамильтоновой схемы, после чего механика получила надежную математическую базу — теорию гамильтоновых систем и канонических преобразований.

Награда за этот тернистый и мучительный путь оказалась достойной — выяснилось, что математические методы эффективны далеко за пределами исходного физического объекта (планеты и пушки — небесная механика и внешняя баллистика). Все огромное индустриальное разнообразие поддерживающих ферм, вращающихся шестерней, переключающих рычагов, льющихся и перекачиваемых жидкостей, упорных грунтов и горных пород и стремительных газов — все это добрая старая механика Эйлера. Техника сегодняшнего дня — это физика вчерашнего дня.

Математический аппарат реагировал лишь несущественными уточнениями на два мощных катаклизма, потрясших основания физических представлений — релятивистский и квантовый пересмотр основ физики.

Сейчас ведущей наукой стала биология. Возникла ли новая ситуация? Появится или нет самостоятельная «теория биологической по-

---

* Уравнения Эйлера — это необходимые (но отнюдь не достаточные) условия экстремума. На плоскости, например $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$, $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$, что дает минимум ($f = x^2 + y^2$), максимум ($f = -x^2 - y^2$) и просто гиперболическую точку ($f = x^2 - y^2$) — максимум по одному направлению и минимум по другому.

Математические методы в биологии.
Киев: Наукова думка, 1983.

движности»? Судить об этом рано. Однако одна ветвь — механохимия — назревает. Что это такое?

Существует биоэнергетика. Она возникла на биохимической, молекулярной основе. Однако изучение митохондрий (основных энергетических комплексов клетки) показывает, что дело не сводится к чистой химии. Существенны и механические (возможно, конфорляционные) процессы. С другой стороны, актомиозиновые комплексы — структурные единицы мышечного «кристалла» — имеют как бы «встроенные» энергокомпоненты (химической, разумеется, природы).

Главное направление сейчас — изучение конкретных систем. Однако никому не заказаны попытки «рыть туннель с другого конца». Например, нет недостатка в «термодинамических» схемах. Это изложение известного на другом языке, да и обилие таких схем вызывает подозрение. Задним числом (a posteriori) можно понять глубокую причину их неплодотворности. Дело в том, что системы (пока они биологические) работают вдали от положения термодинамического равновесия, а также вдали от живого равновесия «спячки». По исходной причине недостаточен и чисто биохимический подход.

Существует, однако, еще одна возможность. Не претендуя на преждевременное построение «общей» теории, можно попытаться угадать ее существенные элементы. Анализ разумно начать с изучения движений, близких к состоянию «живого» равновесия («спячки»). Это заведомо содержательней «термодинамики» и много проще и скромней общей теории биологической подвижности (которая не обязана существовать).

Экстремальные режимы

Применительно к нашему случаю феноменологический * анализ выглядит следующим образом.

Предположим, что «задача решена» и математическая теория биологической подвижности создана. Разберем общие свойства, характерные для любой частной модели.

Прежде всего описание движения потребует нескольких механических степеней свободы. Энергетика (и, вероятно, регуляторные механизмы) — это еще несколько уравнений для химических концентраций. Кроме того, надо задать внешнюю среду и условия функционирования. Поэтому в простейшем случае (постоянство среды и условий) в уравнение войдет несколько параметров.

Итак

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{a}(\vec{x}, \vec{\alpha}), \qquad (1)$$

где $\vec{x}$ — вектор размерности k; $\vec{\alpha}$ — вектор размерности l.

Предположим, что проведено достаточно полное исследование этой системы и построен «структурный портрет», т. е. найдены границы (поверхности) в пространстве $\vec{\alpha}$, разделяющие области с различными

* Исходящий из общих свойств, а не из конкретного механизма.

режимами функционирования. Пересечения этих границ (многообразия размерности l — 2 и меньше) тем интереснее (с точки зрения разнообразия поведения), чем больше поверхностей пересекается. Особый интерес представляют точки максимальной сложности * (в которых пересекаются не меньше, чем l поверхностей). Близкие аналоги этой схемы — теория ветвления решений и теория бифуркаций, но для приложений недостаточно, к сожалению, развитых до сих пор подходов.

Дискретное множество точек максимальной сложности даст полный набор этих типов кинетики («поведения»), к которым вообще способна изучаемая система.

Введем термины «точка кумуляции» для точки максимальной сложности и «экстремальный режим» для кинетики системы в этой точке.

Система в экстремальном режиме обнаруживает свойство, сходное с адаптивностью биологических систем — качественно перестраиваться при изменении внешних условий. Наоборот, вдали от точек кумуляции система устойчива. Более точно она является «грубой», поскольку речь идет об изменении параметров, а термин «устойчивость» использован, к сожалению, в задачах об изменении начальных данных. Любой из этих грубых режимов качественно схож с одним из тех, на которые распадаются экстремальные режимы при сколь угодно малом возмущении.

Различение экстремальных и грубых режимов имеет и чисто практический смысл. Оно намечает правильное «разделение труда» между ЭВМ и человеком. Математик качественно изучает экстремальный режим, «подключая» ЭВМ на количественной стадии. Затем они «вместе» анализируют (количественно и качественно) распадение экстремального режима на грубые, после чего ЭВМ «дотягивает» нужный режим количественно до заданных значений параметров.

Окрестность покоя

Разнообразие экстремальных режимов бесконечно велико, однако изучены весьма немногие, а широко известен всего лишь один — мягкое и жесткое возбуждение колебаний (рождение предельного цикла). Цель настоящей статьи — разбор еще одного важного примера экстремального режима — механо-химического.

Рассмотрим простейшую возможность — одна механическая степень свободы (x и y), одна химическая (концентрация z) и два параметра α и β:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(x, y, z; \alpha, \beta); \\ \frac{dy}{dt} &= g(x, y, z; \alpha, \beta); \\ \frac{dz}{dt} &= h(x, y, z; \alpha, \beta); \end{aligned} \qquad (2)$$

* Крайне неудачно выражение «максимальное вырождение», употребляемое математиками.

Отличие «химической» переменной от «механических» определяется характером правых частей системы.

Параметры α и β выберем так, чтобы вблизи $\alpha = 0$, $\beta = 0$ система имела устойчивую стационарную точку. Линеаризуя нашу систему вблизи этой стационарной точки, мы получим три собственных числа, зависящие, конечно, от параметров α и β. Построим на плоскости α, β линии нулевых корней,

$$\mu(\alpha, \beta) = 0 \tag{3}$$

и линию нейтральности,

$$\operatorname{Re}\lambda(\alpha, \beta) = 0, \tag{4}$$

при пересечении которой и происходит рождение предельного цикла.

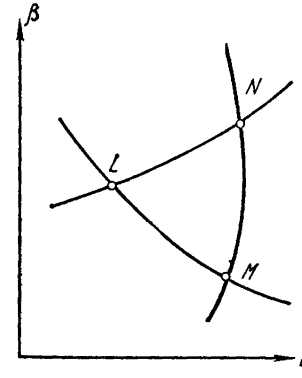

Рис. 1. Границы смены режимов:

NM — линия нейтральности; LN и LM — линии нулевых корней. Точка M — одна из точек кумуляции (один нулевой и два чисто мнимых корня).

Гипотеза. *Точка кумуляции* основных механических режимов есть пересечение линии нейтральности с линией нулевых корней.* Разберем подробнее структуру системы вблизи точки кумуляции. Запишем уравнения, выделив явно главную (линейную) часть:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -y + a(x, y, z;\ \alpha, \beta); \\ \frac{dy}{dt} &= x + b(x, y, z;\ \alpha, \beta); \\ \frac{dz}{dt} &= c(x, y, z;\ \alpha, \beta). \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь величины a, b и c являются «малыми» поправками к невозмущенной линейной системе.

В каком смысле эти поправки малы?

В классической проблеме устойчивости движения ответ ясен — это квадратичные, кубичные и т. д. члены:

$$\begin{aligned} a &= \tilde{a} = a_{11}x^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + a_{22}y^2 + 2a_{23}yz + a_{33}z^2 + \cdots; \\ b &= \tilde{b} = b_{11}x^2 + 2b_{12}xy + 2b_{13}xz + b_{22}y^2 + 2b_{23}yz + b_{33}z^2 + \cdots; \\ c &= \tilde{c} = c_{11}x^2 + 2c_{12}xy + 2c_{13}xz + c_{22}y^2 + 2c_{23}yz + c_{33}z^2 + \cdots \end{aligned} \tag{6}$$

— поправки к линейной части. Эта точка зрения сохранилась и в более современной теории бифуркаций (и несколько претенциозной ветви ее — теории катастроф). Однако для многих приложений (особенно биологических), когда система содержит несколько параметров, эта

* Гармонический осциллятор $\ddot{x} + x = 0$ — это экстремальный режим механики. Весьма правдоподобно также, что $\dot{z} = 0$ есть кумуляция химических (одномерных) режимов. Естественно поэтому рассмотреть «кумуляцию» этих «кумуляций».

точка зрения недостаточна. Необходимо также учитывать сдвиг параметров из точки M. Он приводит дополнительно к малым константным и линейным поправкам, так что полное * возмущение имеет вид

$$\begin{aligned} a &= \varepsilon(a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 z) + \tilde{a}; \\ b &= \varepsilon(b_0 + b_1 x + b_2 y + b_3 z) + \tilde{b}; \\ c &= \varepsilon(c_0 + c_1 x + c_2 y + c_3 z) + \tilde{c}. \end{aligned} \tag{7}$$

Эволюционные уравнения

Главная особенность полученных уравнений — два независимых малых параметра. Это явно написанный параметр ε (характеризующий малое отклонение от M в пространстве параметров) и подразумеваемая малая окрестность стационарной точки.

Выделим в уравнениях (5) эволюционную систему. Для этого следует перейти к полярным координатам

$$\begin{aligned} x &= \rho\cos\varphi; \\ y &= \rho\sin\varphi; \\ z &= z, \end{aligned} \tag{8}$$

выделив явно быструю фазу φ и медленные переменные z и ρ:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} &= 1 + \cdots; \\ \frac{d\rho}{dt} &= a\cos\varphi + b\sin\varphi; \\ \frac{dz}{dt} &= c. \end{aligned} \tag{9}$$

Метод быстро вращающейся фазы позволяет исключить быструю фазу φ (надлежащей заменой переменных) из уравнений для ρ и z. Главные члены этих уравнений — просто средние по быстрой фазе φ от главных членов исходной системы. Дальнейшие выкладки быстро становятся весьма громоздкими, но для наших целей достаточно одного существенного обстоятельства — в системе остаются только резонансные члены:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \rho F(\rho^2, z); \\ \frac{dz}{dt} &= G(\rho^2, z). \end{aligned} \tag{10}$$

Выпишем несколько первых членов:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \rho(\alpha + Az + B\rho^2); \\ \frac{dz}{dt} &= \beta + \gamma z + Dz^2 + C\rho^2. \end{aligned} \tag{11}$$

---

* При сдвиге параметров возникают и малые нелинейности, однако их можно включить в основную нелинейность $\tilde{a}$, $\tilde{b}$, $\tilde{c}$.

Это уравнения главного приближения, если A, B, C, D — константы. Однако эти уравнения становятся точными, если эти величины считать произвольными функциями от ρ^2 и z. В данной статье изучается только окрестность стационарного режима и для наших целей достаточно считать A, B, C и D константами. При изучении тонкой структуры экстремального режима (п. 5) приходится учитывать зависимость A, B, C и D только от z, да и то в линейном приближении.

Существуют, однако, задачи, в которых требуется построение в целом фазового портрета системы в точке кумуляции. В этом случае следует знать функции A, B, C, D во всем фазовом пространстве. Существуют и промежуточные случаи. Если изучаемый режим неустойчив, то укороченная система может генерировать неограниченные решения, а в полной системе это всего лишь переходный процесс в другой стационарный режим (или на предельный цикл). В этом случае нужно выбирать функции A, B, C и D так, чтобы они правильно описывали окрестности обоих стационарных режимов — отталкивающего и притягивающего.

Выбор параметров α, β и γ соответствует удобному выбору системы координат в пространстве параметров — точка кумуляции имеет координаты $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$.

Экстремальный режим

Рассмотрим систему в точке кумуляции ($\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$). Это соответствует точке зрения теории бифуркаций. Система в этой точке имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= A\rho z + \cdots; \\ \frac{dz}{dt} &= c\rho^2 + Dz^2 + \cdots. \end{aligned} \tag{12}$$

Мы оставили только главные, квадратичные члены (не учитывалась, в частности, кубичная нелинейность $B\rho^3$ в первом уравнении). Нетрудно проверить, что полученная система имеет первый интеграл,

$$I(\rho, z) = \rho^{-2k}(z^2 + \theta\rho^2) = \text{const}, \tag{13}$$

где параметры k и θ связаны с коэффициентами системы (12) соотношениями

$$k = \frac{D}{A}; \quad \theta = \frac{c}{D - A}. \tag{14}$$

Фазовый портрет системы, т. е. семейство кривых

$$z^2 = \theta\rho^2 = I\rho^{2k} \tag{15}$$

качественно меняется, когда параметры k и θ проходят через прямые $\theta = 0$, $k = 0$ и $k = 1$.

Следовательно, на плоскости параметров k, θ имеются шесть областей (образованных этими тремя прямыми), внутри которых фазовый портрет сохраняет вид.

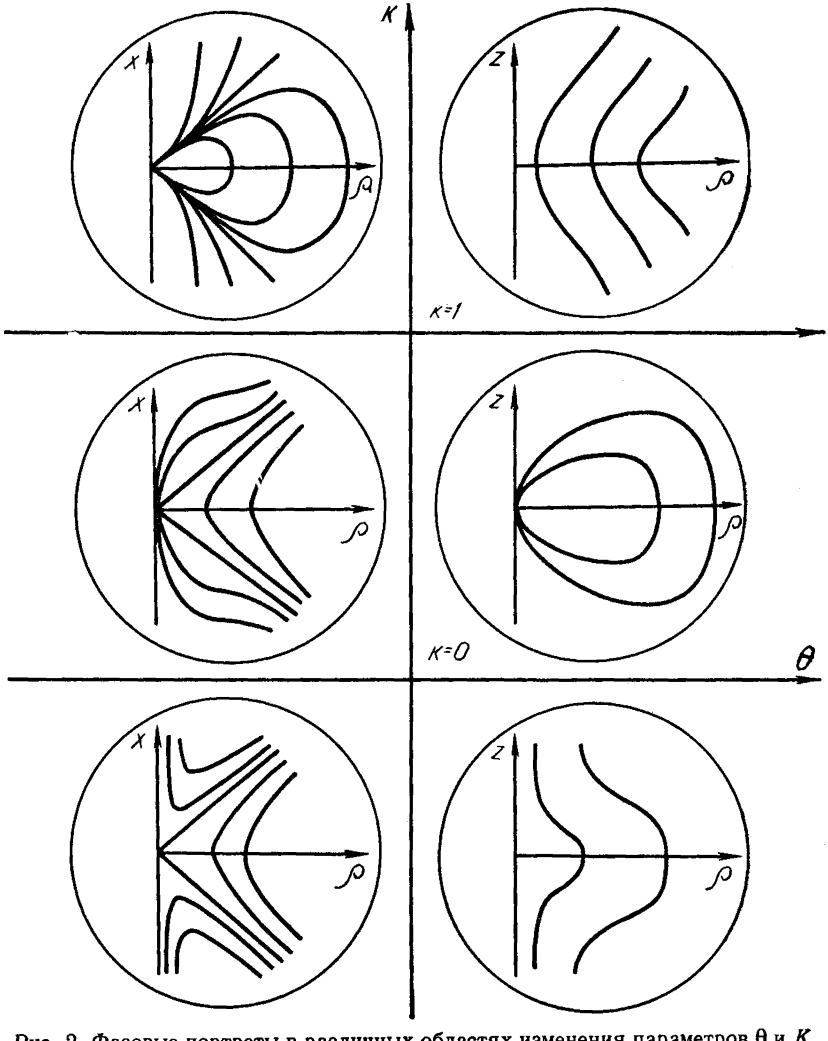

Рис. 2. Фазовые портреты в различных областях изменения параметров θ и K.

Тонкая структура экстремального режима

В предыдущем пункте разобрано влияние только главных членов — квадратичных по переменным ρ и z. Более полная картина возникает, если учесть кубичные члены. При этом величины A, B, C и D нельзя считать константами, но достаточно заменить их линейными по z функциями. Зависимость от ρ^2 даст четвертый порядок и ее можно в этом приближении не учитывать, как и члены вида z^2. Исследование можно провести различными способами, но едва ли не самый простой состоит во введении удобных переменных. Поскольку нас интересует окрест-

ность начала координат, то разумно оставить ρ, а вместо z ввести однородную переменную w, $z = w\rho$.

Перепишем систему (11) в новых переменных (они разумны только при $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$, т. е. в точке кумуляции):

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \rho^2 (Aw + B\rho); \\ \frac{dw}{dt} &= \rho [C + (D - A) w^2 - B\rho w]. \end{aligned} \tag{16}$$

Исключим теперь время, разделив первое уравнение на второе:

$$\frac{d\rho}{dw} = \rho \frac{Aw + B\rho}{C + (D - A) w^2 - B\rho w}. \tag{17}$$

В этом уравнении особенно прозрачна аналитическая структура системы в точке кумуляции. Окрестность начала координат z, ρ переходит в полосу вдоль оси w ($\rho = 0$) в новых переменных. Поэтому правую часть уравнения (17) можно просто разлагать в ряд по степеням ρ, ограничившись двумя первыми членами

$$\frac{d\rho}{dw} = \rho \frac{Aw}{C + (D - A) w^2} - \rho^2 \frac{\varepsilon + Fw^2 + Gw^4}{[C + (D - A) w^2]^2} + \cdots \tag{18}$$

Это уравнение, содержащее новые структурные параметры ε, F и G, которые можно назвать «постоянными тонкой структуры», легко интегрируется. Это — уравнение Бернулли и сводится к линейному делением на ρ^2. Однако исследование получающегося решения — самостоятельная задача, выходящая за рамки данной статьи. Здесь ограничимся одним принципиальным замечанием. Уравнение (18) дает правильную асимптотику (при $\rho \to 0$) всюду, кроме нулей знаменателя

$$C + (D - A) w^2 = 0, \tag{19}$$

которым соответствуют прямолинейные решения на левых фазовых портретах ($\theta < 0$) рис. 2.

Окрестность этих двух особых точек на оси w ($\rho = 0$) необходимо исследовать прямо из уравнения (17).

Нейтральные возмущения экстремального режима

Изучение распадения экстремального режима при сдвиге параметров является трудной задачей. В данной статье ограничимся указанием одного замечательного обстоятельства, существенно облегчающего анализ ситуации. Оказывается, что из трехпараметрического (α, β и γ) семейства сдвигов двухпараметрическое семейство, задаваемое условием

$$\gamma = \frac{2D}{A} \alpha, \tag{20}$$

сохраняет первый интеграл системы. В этом смысле эти возмущения названы нейтральными. Выпишем этот интеграл. Рассмотрим систему (11), откинув в ней кубические нелинейности (в частности, $B\rho^3$,

а величины A, D и C считаем постоянными), но сохранив параметры сдвига α, β и γ.

Разделим второе уравнение на первое:

$$\frac{dz}{d\rho} = \frac{Dz^2 + \gamma z + \beta + C\rho^2}{\rho(\alpha + Az)}. \tag{21}$$

Умножим обе части равенства на $(\alpha + Az)$:

$$(Az + \alpha)\frac{dz}{d\rho} = \frac{1}{\rho}(Dz^2 + \gamma z + \beta) + C\rho. \tag{22}$$

Теперь становится понятным смысл условия (20). Оно означает, что уравнение (22) — линейное относительно величины

$$U = Dz^2 + \gamma z + \beta. \tag{23}$$

Само уравнение (22) приобретает вид

$$\frac{A}{2D}\frac{du}{d\rho} = \frac{u}{\rho} + C\rho. \tag{24}$$

Интегрирование этого уравнения дает следующий первый интеграл:

$$\left[z^2 + \frac{\gamma z + \beta}{D(D-A)} + \frac{C}{D-A}\rho^2\right]\rho^{-2k} = \text{const}. \tag{25}$$

Понятно, что при $\gamma=0$, $\beta=0$ этот интеграл совпадает с найденным ранее (13). В общем случае получаем фазовый портрет системы при любых β и γ:

$$z^2 + \frac{\gamma z + \beta}{D(D-A)} + \frac{C}{D-A}\rho^2 = I\rho^{2k}. \tag{26}$$

При этом подразумевается, что α связано с γ соотношением

$$\alpha = \frac{A}{D}\gamma. \tag{27}$$

Сдвиг из этой плоскости * приводит к разрушению интеграла (26).

Более подробное изучение фазового портрета (26) и явлений, происходящих при сдвиге из плоскости с линии (27), остаются за рамками данной статьи.

Обсуждаемый здесь вопрос идейно близок к обнаруженному Н. Н. Боголюбовым замечательному явлению высокочастотной стабилизации седловых точек.

Из системы (11) видно, что параметры β и γ суть собственные числа линеаризованной системы. Поэтому $\beta = 0$ и $\gamma = 0$ соответствуют нейтральности системы. Сдвиг этих параметров приводит либо к устойчивости, либо к неустойчивости этой стационарной точки. Однако выполнение условия (27) сохраняет первый интеграл (26) полной системы, что является аналогом сохранения нейтральности (вообще говоря, индефинитной!) полной системы, несмотря на возникновение грубости линейного приближения. Это означает, по-видимому, что наличие быстрой фазы и вытекающее из этого осреднение приводит к таким спе-

* Условие (27) есть уравнение плоскости в трехмерном пространстве параметров α, β, γ.

циальным типам правых частей системы эволюционных уравнений, к которым не применены соображения «общего положения», т. е. мы попадаем в пространство коэффициентов системы на такие удивительные поверхности, на которых отказывает привычная интуиция грубых систем.