

БІОФІЗИКА СКЛАДНИХ СИСТЕМ

УДК 577.3

О ВОЗМОЖНОМ СЦЕНАРИИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД

В.П. Шестопапов

*Институт радиофизики и электроники им. А.Я. Усикова НАН Украины,
ул. Академика Проскуры, 12, г. Харьков, 61085, Украина*

Статья поступила в редакцию 14 декабря 1999 г.

Результаты стационарной теории дифракции, спектральной теории открытых систем и теории морсовских критических точек дисперсионных уравнений краевых самоорганизующихся биосред позволили установить аналитические законы дисперсии и на их основе построить нелинейные эволюционные уравнения, описывающие локальные пространственно-временные процессы сплошной среды биомакромолекул. На простейших примерах решения нелинейных эволюционных уравнений для плоских границ раздела сред показано многообразие динамических явлений при самоорганизации макромолекул.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: дифракция, дисперсия, катастрофа, граница, самоорганизация, хиральность.

Активные биологические среды прошли временную добиологическую (химическую), самоорганизующую (появление реплицирующихся структур) эволюцию и эволюцию отдельных видов (фазы). Теория самоорганизации описывается обыкновенными нелинейными дифференциальными уравнениями, получение и решение которых связано с определенными модельными представлениями и определяются постоянными или зависящими от времени коэффициентами, а также начальными условиями. При таком подходе реальная эволюция биологических сред, образованных совокупностью макромолекул, может быть изучена только частично. Для ее более полного исследования требуется учитывать не только временные, но и пространственные характеристики динамического поведения системы, что возможно при использовании дифференциальных уравнений в частных производных. С их помощью можно сформулировать краевую задачу, в которой учитывается влияние границ среды на весь процесс пространственно-временной эволюции биосред. Поэтому поиск методов построения (и решения) нелинейных эволюционных уравнений (НЭУ) граничных активных кооперативных сред и использования их для анализа процесса самоорганизации на макромолекулярном уровне является актуальной, но очень трудной задачей, поскольку необходимо правильно выявить физические особенности исследуемого процесса, а также найти математические процедуры их описания. И, пожалуй самое важное, установить связь между макроскопическими параметрами, с помощью которых необходимо исследовать проблему, и свойствами среды, образованной биомакромолекулами.

В этой работе предпринята попытка построения НЭУ для определенных биосред и возможность их решения для одно, двух и трехмерных систем с простейшими граничными условиями. Развитый подход основывается на исследовании задач стационарной теории дифракции, спектральной теории открытых (диссипативных) структур, теории морсовских критических точек дисперсионных уравнений, построения сначала линейных, а затем и нелинейных эволюционных уравнений и их изучения в случае плоского раздела активных и пассивных сред. Хотя хорошо известно, что макромолекулы имеют определенную хиральность, мы в дальнейшем ограничимся случаем, когда образованная из таких молекул непрерывная среда обладает только диэлектрическими изотропными (в крайнем случае анизотропными) свойствами.

При получении НЭУ сначала будем считать, что основным свойством самоорганизующейся биосреды является ее эволюция, а динамика процесса имеет стационарный характер и осуществляется плавно за счет внутреннего развития; стационарность же обозначает их периодическую повторяемость во времени и пространстве. Это позволяет ввести в рассмотрение вместо времени и координат такие фундаментальные величины как частоту и волновой вектор и сформулировать для них линейную спектральную задачу.

Исследование спектральной задачи связано с решением однородных линейных дифференциальных уравнений в частных производных с заданными граничными условиями и условием на бесконечности для функции, зависящей от частоты и пространственных координат. Условие на бесконечности играет определяющую роль, поскольку связано с конкретными свойствами биосреды. Конечной целью решения спектральной задачи является определение спектра и его локализации в пространстве спектральных

(частота) и несектральных (волновой вектор, свойства среды, управляющие величины) параметров, что позволяет установить дисперсионные уравнения. Мы ограничимся изучением динамических систем с дискретным комплекснозначным спектром, присущим диссипативным средам, свойства которых описываются несамосопряженными операторами. Обычно дисперсионные уравнения имеют очень сложный вид и нахождение их корней (спектра) представляет трудную задачу. Дисперсионные кривые (законы дисперсии) для регулярных точек спектра имеют классическую форму нормальной или аномальной дисперсии. Отметим, что дисперсионные закономерности можно получить любым другим способом, например, используя результаты экспериментов. Что же касается рассмотренной спектральной теории, то она может быть развита для таких активных (в том числе и биологических) сред, для которых справедливы исходные уравнения типа уравнений Максвелла в электродинамике.

Второй важной чертой эволюции биосред является взаимодействие ее частей: оно может быть линейным, когда части среды существуют фактически независимо и нелинейной, когда эта зависимость существенна. Если иметь в виду последнее, то НЭУ получаются как результат баланса дисперсии и нелинейности (при этом дисперсия играет деструктивную, а нелинейность - созидательную роль). При дальнейшем установлении НЭУ главное внимание уделяется процессам дисперсии, а нелинейность вводится обычным путем, предполагая ее слабой. Для классических законов дисперсии эволюция протекает плавно. Поэтому длительное и нормальное развитие самоорганизации биосистем происходило по законам классической дисперсии. Возникающие катастрофические ситуации и их влияние на дальнейший ход эволюции требовали специального исследования. Одной из возможных причин катастроф при самоорганизации биосистем является наличие критических точек спектра в дисперсионных уравнениях и, в частности, изолированной невырожденной морсовской критической точки (МКТ). Исследованию самоорганизации биосистем вблизи МКТ посвящена данная работа.

ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ

Будем считать, что самоорганизующаяся биосистема представляет собой сплошную среду, в которой бесконечно большое число макромолекул бесконечно малых размеров образуют активный конгломерат. При таком подходе детальное описание пространственно-временных процессов внутри каждой макромолекулы отсутствует, а распространение взаимодействия может происходить от молекулы к молекуле, т.е. здесь внешняя среда, в которую погружен конгломерат, определяется поверхностями раздела. Наличие граничных условий приводит к принципиальным отличиям в изучении эволюционных процессов таких активных сред. Это касается и постановки краевой задачи, и методов их решения.

Рассмотрим более детально сначала линейные краевые задачи, обратив особое внимание на изучение дисперсионных закономерностей активной среды. С этой целью ограничимся пока стационарными процессами, и в качестве первого шага проанализируем рассеяние, возникающее при возбуждении среды стационарным источником. Это типичная задача дифракции. Ее решение позволит установить аналитические методы, которые затем могут быть перенесены при построении спектральной теории. Следует иметь в виду, что реальная самоорганизующаяся система построена из хиральных макромолекул, для которых характерным являются специфические поляризационные свойства среды, преобразующие скалярную функцию источника в циркулярно поляризованные колебания и волны. Однако, в данной работе мы ограничимся средами и границами раздела с чисто скалярными свойствами. Заметим, что хиральные биосреды наиболее приспособлены для структурных изменений. Эволюционные процессы будем описывать функцией $u(t, x, y, z)$, где u - концентрация молекул в среде; t - время; x, y, z - пространственные координаты. Для стационарного случая вводится безразмерная частота κ и искомая функция имеет вид $u(\kappa, x, y, z)$. Функцию источника обозначим через $u^o(\kappa, x, y, z)$. Предполагаем, что полная концентрация $\tilde{u} = u^o + u$, а \tilde{u} - удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца. Ограничимся граничными условиями $\tilde{u} = 0$ при $x, y, z \in S$, где S - поверхность раздела, условиями Мейкснера и условием Зоммерфельда на бесконечности. Для поставленной таким образом задачи решение существует и оно единственно.

Конструктивное строгое решение возможно только для определенного источника и граничных условий, которыми могут быть плоская волна концентрации и идеальные поверхности раздела. Развитые [1] методы регуляризации позволяют получить вместо уравнений Гельмгольца функциональные уравнения второго рода $(I + H)x = b$, $x, b \in l_2$, допускающие аналитическое или с любой наперед заданной точностью решения (здесь I - единичный, H - компактные операторы в пространстве l_2 квадратично суммируемых последовательностей; x - безразмерная функция, с помощью которой определяется концентрация биомолекул в среде; b - источник). Методом задачи Римана-

Гильберта теории аналитических функций или методом интегральных преобразований типа дробного интегрирования или дифференцирования удалось в явном виде построить оператор H . Полученные таким способом алгоритмы обладают уникальными свойствами, и, что самое важное, их можно применить к решению спектральных задач, построению теории МКТ и МКТ для самоорганизующихся биосред.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОТКРЫТЫХ СТРУКТУР

Для недиссипативных сред (в частности, закрытых) собственные частоты (и волновые векторы) - вещественны. Математически корректное "аналитическое продолжение" задачи дифракции в область комплексных значений частоты позволяет исследовать спектральные свойства диссипативных сред. Центральным при этом является вопрос замены условия на бесконечности Зоммерфельда условиями Рейхардта [1]. В этом случае краевая задача "аналитически продолжается" на поверхность Римана (функции $\ln \kappa$) комплексных значений κ с дискретным множеством $\{\kappa_n\}$ и единой точкой накопления на бесконечности ($\{\kappa_n\}$ - собственные значения однородной задачи, которым отвечают собственные функции ψ_n , причем κ_n являются полюсами аналитического продолжения резольвенты оператора исходной задачи дифракции [1]). Адекватным математическим аппаратом спектральной теории открытых структур является теория мероморфных оператор-функций; воспользоваться ее методами удалось с помощью процедур регуляризации.

Задача на собственные значения и собственные функции с условием Рейхардта сводится теперь к спектральной задаче для оператор-функции $I + H(\kappa)$, т.е. к определению множества таких чисел κ_n векторов ψ_n , при котором однородное уравнение имеет нетривиальное решение, т.е. $[I + H(\kappa)]\psi_n = 0$. Особенно важно, что спектральная задача для оператор-функции $I + H(\kappa)$ допускает эффективное аналитическое и численное решение. Традиционно используемые дисперсионные уравнения $\det[I + H(\kappa)] = 0$ в комплексной области изменения κ приобретают четкий математический смысл (также как и комплексные корни κ_n) и отвечающие им собственные функции: они ответственны за резонансное поведение полей при $\kappa \approx \text{Re } \kappa_n$ ($\text{Im } \kappa_n \ll 1$) (κ_n - лежат на "физическом" листе; имеют место резонансы для тех κ_n , которые лежат на других листах поверхности Римана). Эти результаты присущи как для координатных, так и некоординатных однородных краевых задач.

Задачи дифракции являются многопараметрическими: их решение зависит от геометрии рассеивателей, свойств материальной биосреды и др. Выделим один из них ω , исследуем свойства $\kappa_n = \kappa_n(\omega)$ и $\psi_n = \psi_n(\omega)$. Теперь ряд биофизических эффектов можно понять и обнаружить при анализе характеристического определителя задачи - аналитической функции двух комплексных переменных $F(\kappa, \omega) = \det[I + H(\kappa, \omega)]$ в области ее аналитичности. Анализ нормальных точек $F(\kappa, \omega)$ позволяет не только установить классические законы дисперсии, но в критических точках также и явления "взаимодействия" собственных колебаний при изменении ω , вскрыть ряд новых биофизических проявлений этого явления. Развитая спектральная теория является мощным инструментом анализа свойств сложных открытых самоорганизующихся биоструктур.

Решение спектральной задачи для простейшей активной среды, образованной идеально-отражающими цилиндрическими круговыми экранами с соосными им биообъектами имеет вид линейной суперпозиции рядов Фурье. При построении матричных оператор-функций необходимо удовлетворить всем условиям задачи, что приводит к связным парным сумматорным уравнениям с тригонометрическим ядром, которые методом задачи Римана-Гильберта сводятся к бесконечной системе алгебраических уравнений второго рода, которые эквивалентным образом можно преобразовать в операторные уравнения

$$[I + A(\kappa)]x = \theta, \quad (1)$$

где $A(\kappa)$ - оператор-функция исследуемой задачи, x - безразмерные фурье-компоненты функции концентрации u , θ - нулевой элемент.

Спектр открытой структуры совпадает с множеством характеристических чисел оператор-функции $I + A(\kappa)$ и является конечнократным, дискретным и расположен в области $\{\kappa : \text{Im } \kappa < 0\}$. Таким образом, для любых $R_1 > 0$ и $R_2 > 0$ в области $\{\kappa : \pi < \arg \kappa < 2\pi, R_1 < \kappa < R_2\}$ содержится лишь конечное число собственных частот спектральной задачи. Заметим, что при $\kappa \rightarrow 0$ - оператор $[I + A(\kappa)]^{-1}$ ограничен и собственные частоты отсутствуют. Кроме того, спектр задачи симметричен, т.е. если κ - спектральная точка, то и κ^* принадлежит спектру. Существенно, что рассматриваемая здесь биосреда обладает высокодобротными колебаниями, т.е. ее собственные частоты близко располагаются возле вещественной оси.

Спектральные характеристики исследуемой среды сведены к определению нетривиальных решений уравнения второго рода (1) для конечномероморфной функции $A(\kappa)$. Свойства $A(\kappa)$ (способность порождать матрицу Кох) позволяют строить алгоритм поиска спектра на приближенном решении характеристического уравнения

$$F(\kappa) \equiv \det[I + A(\kappa)] = 0. \quad (2)$$

Необходимо отметить, что в дисперсионном уравнении (2) уже заключены важные данные о свойствах исследуемой биосреды. Прежде всего это связано с линейными стационарными процессами, благодаря которым в фазовых переменных можно установить формирование потоков макромолекул при наличии границ среды и возможно связать их с генетическим кодом. И хотя (1), (2) описывает скалярное состояние, решение задачи для хиральной сплошной среды позволяет провести анализ преобразующего влияния хиральных биомолекул на превращение скалярной функции плотности в векторную. Кроме того, сами дисперсионные уравнения (2) в фазовых переменных дают картину процесса дисперсии в самоорганизующей системе, а также позволяют построить теорию критических точек этих уравнений и ввести в рассмотрение различные параметры, характеризующие свойства самоорганизующейся биосреды еще на уровне решения линейной стационарной спектральной задачи.

ТЕОРИЯ МОРСОВСКИХ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК ДИСПЕРСИОННЫХ УРАВНЕНИЙ

Если считать, что полюсы резольвенты задачи (1) простые, то появление вырождения собственной частоты означает выход на ситуацию, в которой одному собственному значению отвечает несколько независимых свободных колебаний поля в среде, что практически исключено при изменении параметров в физической области, но возможно в метрике комплексного пространства (двум собственным частотам κ_1, κ_2 соответствуют свободные колебания разных типов и одного класса симметрии). Свободные колебания начинают "взаимодействовать", что приводит к существенным локальным и глобальным изменениям их спектральных характеристик граничной сплошной биосреды. В частности, нарушается регулярный ход спектральных кривых $\kappa(\omega)$, на которых реализуются нулевые линии равного уровня функции $F(\kappa, \omega) \equiv \det[I + A(\kappa, \omega)]$ как отображения, $F: \mathbb{H} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ (\mathbb{C} - комплексная плоскость; \mathbb{R} - пространство вещественных чисел изменения несектрального, в частности, параметра ω ; \mathbb{H} - множество нетривиальных решений спектральной задачи). Это означает, что траектория $\kappa(\omega)$ проходит вблизи критической точки отображения $F(\kappa, \omega)$ [2]. Чтобы использовать результаты теории особенностей гладких отображений, продолжим оператор-функцию $A(\kappa, \omega)$ в область комплексных значений несектрального параметра ω и рассмотрим $F(\kappa, \omega)$ как отображение $\mathbb{C} \times \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ с областью определения D , в которой $F(\kappa, \omega)$ является аналитической функцией двух комплексных переменных κ и ω .

Обозначим $\Omega(\omega) = \{\{\kappa, \omega\} \in D: F(\kappa, \omega) = 0\}$ аналитическое множество в D . Из теории функций многих комплексных переменных и теории особенностей гладких отображений известно, что вблизи $\Omega(\omega)$ существует изолированная особая (критическая) точка (κ_o, ω_o) и локальная система $\Omega(\omega)$ в ее окрестности определяется ее расположением относительно $\Omega(\omega)$ и типом. Вдали от (κ_o, ω_o) $\Omega(\omega)$ локально устроено как гиперплоскость. Взаимодействие свободных колебаний обнаруживает себя характерным законом дисперсии, т.е. особым поведением двух собственных частот

как функций $\kappa(\omega)$ при $\text{Im}\omega = 0$. Устройство $\Omega(\omega)$ как гиперплоскости не отвечает этому закону, поэтому считаем, что в зоне взаимодействия, продолженной на комплексные значения ω , находится критическая точка (κ_0, ω_0) отображения $F(\kappa, \omega)$, т.е. $F_\kappa = F_\omega = 0$ при $\{\kappa, \omega\} = \{\kappa_0, \omega_0\}$ (F_κ, F_ω - частные производные F). Если (κ_0, ω_0) изолирована в D и не вырождена (морсовская критическая точка - МКТ), т.е. $F_{\kappa\kappa}F_{\omega\omega} - F_{\kappa\omega}^2 \neq 0$, то уравнение $F(\kappa, \omega) = 0$ вблизи (κ_0, ω_0) с точностью до кубически малых членов $(\kappa - \kappa_0)^i (\omega - \omega_0)^m$, $i + m \geq 3$ можно записать в виде

$$\tilde{\kappa}^2 + \tilde{\omega}^2 + \delta = 0, \quad (3)$$

где согласно теореме Морса $\tilde{\kappa} = \varphi_1(\kappa, \omega)$, $\tilde{\omega} = \varphi_2(\kappa, \omega)$, а $\delta = F(\kappa_0, \omega_0) \neq 0$. При $\delta = 0$, $\tilde{\kappa} = \pm i \tilde{\omega}$, соответствующий корень двукратно вырожден, свободные колебания среды не взаимодействуют. Если $\delta \neq 0$, то (3) задает поведение дисперсионных кривых, характерное для взаимодействующих колебаний. Таким образом, $\delta = F(\kappa_0, \omega_0)$ определяет степень взаимного влияния колебаний при сближении их собственных частот в комплексном пространстве.

Теперь решение (3) достаточно рассмотреть как зависимости $\text{Re}\tilde{\kappa}(\tilde{\omega})$ и $\text{Im}\tilde{\kappa}(\tilde{\omega})$, когда $\tilde{\omega}$ заменяется вдоль прямых $\text{Re}\tilde{\omega} = \xi$ и $\text{Im}\tilde{\omega} = \alpha\xi + \beta$ (ξ - действительная переменная; α, β - вещественные параметры). Получаемые из (3) четырехпараметрические семейства кривых содержат при определенных α, β, δ типичные для взаимодействующих свободных колебаний образцы дисперсионных кривых.

Итак, существование изолированных МКТ отображения $F(\kappa, \omega)$ приводит к появлению вблизи $\{\kappa_0, \omega_0\}$ двух решений спектральной задачи (1), (2). Характер поведения этих решений при вариации ω определяется (3) и зависит от α, β, δ : при $\delta = 0, \beta = 0$ траектория ω проходит через МКТ, корень (κ_0, ω_0) двукратно вырожден; при $\delta = 0, \beta \neq 0$ траектория не проходит через МКТ, малое "шевеление" β может привести к вырождению собственной частоты; если $\delta \neq 0$ - вырождения нет.

Аппарат теории особенностей гладких отображений, использованный для аналитического описания процессов взаимодействия свободных колебаний, может быть применен при анализе сложного поведения возбуждения открытых структур, изучения эволюционных процессов и др. Эффективность такого подхода в том, что он позволяет заранее установить канонические формы поведения характеристик на тех локальных участках, где оно не может быть однозначно спрогнозировано на основе предшествующих данных.

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ ВБЛИЗИ МОРСОВСКИХ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК

Уникальной особенностью МКТ дисперсионных уравнений линейной спектральной задачи является аналитическая природа, что позволяет записать эти уравнения относительно спектральных и несспектральных параметров в виде равенства нулю квадратичной формы (3), представляя тем самым специфические дисперсионные закономерности линейной стационарной биосистемы вблизи МКТ, которые существенно отличаются от обычного нормального или аномального законов дисперсии. Вблизи МКТ происходит резкий переход от нормальной к аномальной (и наоборот) дисперсии ("схлопывание" дисперсии), а в самой МКТ возникает бездисперсионная ситуация ("окно" дисперсии). Существенно, что дисперсионное уравнение (3) позволяет простым способом перейти к описанию линейных и, что особенно важно, нелинейных нестационарных (эволюционных) процессов, а также определить влияние биопараметров среды на дисперсию вблизи МКТ.

Таким образом, спектральные точки являются регулярными (им соответствуют линейные моностабильные колебания) или критическими - МКТ - (в МКТ образуется нестабильное гибридное колебание). Вблизи МКТ колебания взаимодействуют, и, согласно (3), существует три колебания, два из которых устойчивы и одно - неустойчиво. Одно из устойчивых колебаний - высокочастотное; второе - низкочастотное. Природа этих трех колебаний определяется чисто дисперсионными свойствами колебательной биосреды. В нелинейных системах нелинейный бистабильный элемент (триггер) возникает при нелинейном взаимодействии частей среды. Триггер обладает двумя устойчивыми состояниями, в каждом из которых он может находиться неограниченно долго, и только внешние воздействия могут переводить его из одного состояния в другое. Аналогично ведут себя два устойчивых

(высокочастотное и низкочастотное) колебания вблизи МКТ и переход из одного в другое осуществляется внешним воздействием: это бистабильное состояние – дисперсионное явление в линейной стационарной колебательной биосистеме.

Существенно, что наличие бистабильного состояния биосистемы вблизи МКТ позволяет на уровне линейного спектрального анализа ввести необходимые для дальнейшего изучения эволюционных процессов биопараметры, характеризующие свойства самоорганизующихся структур. С другой стороны, если нам удалось построить дисперсионные кривые вблизи МКТ, исходя, например, из естественных данных или эксперимента, то мы можем судить о свойствах тех биопараметров, которые привели к этим кривым (“обратная задача”).

Для чисто временной эволюции введение в рассмотрение биопараметров наиболее предпочтительно для случая, когда дисперсионное уравнение (3) разрешено относительно $\hat{\kappa}$ и представлено в виде

$$\hat{\kappa}_{1,2} = \pm i \frac{1}{2\sqrt{2\delta}} (\hat{\omega} + \delta), \quad (4)$$

где $\hat{\kappa} = \lambda_1^{-1/2} \tilde{\kappa}$; $\hat{\omega} = \lambda_2^{-1/2} \tilde{\omega}$; $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left\{ a + b \pm \left[(a+b)^2 - 4c \right]^{1/2} \right\}$; $a = F_{\kappa\kappa}$; $b = F_{\omega\omega}$; $c = \lambda_1 \delta - \lambda_2^2$.

Теперь спектральный параметр $\hat{\kappa}_{1,2}$ можно сопоставить с той индивидуальной генетической информацией, которой располагает исследуемая граничная самоорганизующая сплошная биосреда. Неспектральный параметр $\hat{\omega}$ связан с внутренней селективной ценностью $AQ - D$, где AQ – представляет метаболизм спонтанных образований и разложений Du – молекулярного вида (u – концентрация биомолекул). При этом $AQ - D - \bar{E} = \hat{\omega}$ (\bar{E} – средняя избыточная продуктивность) и в (4) первый член определяет основные свойства дисперсии. Что же касается величины $\delta \equiv F(\hat{\kappa}_0, \hat{\omega}_0) \neq 0$, то она задает темп мутаций, и $\delta \ll AQ$, т.е. скорость репродукции AQ обычно велика по сравнению со скоростью мутаций.

Введенные в (4) биопараметры среды, позволяют на уровне решения линейной стационарной спектральной задачи без дополнительных модельных построений рассмотреть дисперсионные закономерности вблизи МКТ. Заметим, что полученные данные отличаются от известных феноменологических подходов [3, 4] строгой в математическом отношении постановкой задачи и ее решения. Кроме того, ясно, что классическая дисперсия самоорганизующихся сред описывает поведение биосистемы, характерное для дарвиновской эволюции, когда сам нестационарный процесс протекает сравнительно плавно и за очень длительный промежуток времени. Оказывается, согласно (3), (4) могут возникать в дисперсии среды такие ситуации, когда дисперсия вблизи МКТ изменяется за сравнительно короткое время очень резко (катастрофически). Эту проблему мы и будем иметь в виду при переходе от дисперсии к эволюции.

В уравнениях (3), (4) неспектральным параметром является величина, связанная со свойствами биомолекул самоорганизующейся непрерывной среды. В таком же качестве может выступать, кроме $\hat{\omega}$, также и проекция волнового вектора γ_1 на выбранную ось. Тогда самое общее дисперсионное уравнение имеет вид $F(\kappa, \gamma, \omega) = 0$, а вблизи МКТ оно может быть представлено следующим образом

$$\lambda_1 \tilde{\kappa}^2 + \lambda_2 \tilde{\gamma}_1^2 + \lambda_3 \tilde{\omega}^2 + \delta = 0, \quad (5)$$

где $\tilde{\kappa} = \kappa - \kappa_0$, $\tilde{\gamma}_1 = \gamma - \gamma_0$, $\tilde{\omega} = \omega - \omega_0$, $\delta = F(\kappa_0, \gamma_{10}, \omega_0) \neq 0$; $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \in \mathbb{C}$ – корни кубического уравнения; $(\kappa_0, \gamma_{10}, \omega_0)$ – МКТ, определяемая из системы уравнений $F_\kappa = F_{\gamma_1} = F_\omega = 0$ и условия неравенства нулю детерминанта матрицы Гессе.

В пространственном случае волновой вектор будет $\vec{\gamma}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ и при наличии управляющего параметра ω дисперсионное уравнение можно записать в виде $F(\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \omega) = 0$. Функция F определена в пространстве \mathbb{C}^5 , т.е. является функцией пяти комплексных переменных $\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \omega$. Вблизи МКТ $(\kappa, \gamma_{10}, \gamma_{20}, \gamma_{30}, \omega_0)$ отображения $F: \mathbb{C}^5 \rightarrow \mathbb{C}$ имеет вид

$$\left\{ (\kappa_0, \gamma_{10}, \gamma_{20}, \gamma_{30}, \omega_0) \right\} = \left\{ (\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \omega) : F_\kappa = F_{\gamma_{10}} = F_{\gamma_2} = F_{\gamma_3} = F_\omega = 0, \det J_\Gamma \neq 0 \right\}, \quad (6)$$

где J_{Γ} - матрица Гессе. Гиперповерхность $\Omega(\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \omega) = \{(\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \omega) : F(\kappa, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) = 0\}$ вблизи МКТ с точностью до кубических малых членов представляется в виде канонической квадратичной формы, а дисперсионное уравнение запишется в виде

$$\lambda_1 \tilde{\kappa}^2 + \lambda_2 \tilde{\gamma}_1^2 + \lambda_3 \tilde{\gamma}_2^2 + \lambda_4 \tilde{\gamma}_3^2 + \lambda_5 \tilde{\omega}^2 + \delta = 0, \quad (7)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5 \in \mathbb{C}$ - корни характеристического многочлена пятой степени.

Дисперсионные уравнения (5), (7) отличаются от (3), (4) тем, что с их помощью можно исследовать пространственные фазовые характеристики сплошной биосреды, и, наряду с колебательными, изучать также волновые процессы. Последнее позволит выяснить влияние границ среды на процессы самоорганизации биомакромолекул, и, в какой-то степени, дать ответ на вопрос: где же все-таки были наиболее благоприятными условия для возникновения жизни - в океане, море или луже и действительно ли во всех случаях требовалась столь продолжительная во времени эволюция, как это вытекает из дарвиновской теории эволюции.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭВОЛЮЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ ВБЛИЗИ МОРСОВСКИХ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК СПЕКТРА

Существующие методы исследования динамических процессов базируются на установлении баланса нелинейности и дисперсии в системе: решение проблемы ограничивается случаем, когда законы дисперсии определяются только регулярными точками спектра, т.е. дисперсия является нормальной или аномальной. Этот подход существенно дополняется учетом дисперсии вблизи МКТ; для искомой величины можно получить НЭУ, а также ввести обобщенные параметры, исходя из анализа линейной спектральной задачи.

Рассмотрим сначала чисто временную эволюцию. Для получения сначала линейных, а затем и НЭУ воспользуемся дисперсионным уравнением (4), имея в виду, что \hat{K} при этом можно заменить оператором дифференцирования $i \frac{d}{d\tau}$, где безразмерное τ линейно зависит от истинного времени t .

Теперь вместо (4) имеем

$$\frac{d u_{1,2}}{d\tau} = \mp i (\hat{\omega} + \delta) u_{1,2} + \mu, \quad (8)$$

где $u = u(\tau)$ - функция концентрации биомакромолекул, а $\mu = const$, введенная феноменологическим путем константа, характеризующая внешнее воздействие на среду.

Особенностью (8) является их локальный характер, т.е. протекание эволюции вблизи МКТ за сравнительно короткий промежуток времени, по сравнению с эволюционным процессом в целом. Поскольку при этом эволюция является катастрофической, то следует ожидать таких временных качественных изменений среды, которые требуют соответствующего описания. Если еще и иметь в виду нелинейность (8) (за счет того, что $\hat{\omega} = \hat{\omega}(u, t)$), то эволюционные процессы вблизи МКТ станут причиной возникновения уникальной ситуации, когда самоорганизация биомакромолекул происходит за очень короткий промежуток времени, а также предвестники жизни как гиперциклы [4] являются результатом этих катастрофических изменений среды (это, в какой-то мере, напоминает эволюцию оледенений в Северном полушарии Земли; оказывается этот процесс может протекать не только сотни и тысячи лет, а в течение 3 - 5 лет [5]).

Запишем теперь пространственно-временные эволюционные уравнения, сначала для одномерного, а затем трехмерного случаев. Для этого воспользуемся (5), заменяя $\hat{K} = i \frac{\partial}{\partial \tau}$ и $\hat{\gamma}_1 = -i \frac{\partial}{\partial \xi}$, где τ и ξ - безразмерное время и пространственная координата, связанные с истинным временем t и координатой x линейными соотношениями $\tau = \alpha_1 x + \beta_1 t$; $\xi = \alpha_2 x + \beta_2 t$, где $\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$ определяются для каждого случая отдельно.

Теперь мы имеем эволюционное уравнение в частных производных

$$\lambda_1 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - \lambda_2 \frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} = c u \quad (9)$$

Это линейное уравнение Клейна-Гордона, где $c = \omega + \lambda_1 \delta - \lambda_2^2$. При $\lambda_1 = \lambda_1(u)$, $\lambda_2 = \lambda_2(u)$ и $c = c(u)$ имеем НЭУ вблизи МКТ.

Используя (7), получим многомерное НЭУ, которое вблизи МКТ можно записать в виде

$$D(u) - s(|u|) \frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} = \varphi(|u|)u, \quad (10)$$

где D - нелинейный эллиптический дифференциальный оператор с коэффициентами, зависящими от $|u|$. Функции s и φ будем считать вещественнозначными, причем s должна принимать лишь положительные значения, т.е. полученное уравнение гиперболическое. Для упрощения будем далее рассматривать достаточно универсальный частный случай этого уравнения, сохраняющий его основные особенности,

$$\Delta u - s(|u|^2) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \varphi(|u|^2)u, \quad (11)$$

где Δ - оператор Лапласа. Это уравнение обобщает одновременно нелинейное волновое уравнение и уравнение Клейна-Гордона.

Существенно важно связать коэффициенты уравнений (9) - (11) со свойствами самоорганизующейся биосреды, т.е. характеристиками макромолекул. Здесь мы этим заниматься не будем, а только покажем, какова роль границ среды для одно-, двух- и трехмерных задач.

РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ

При определенных условиях решения (9) - (11) можно получить в замкнутой форме. Продемонстрируем это на примере одно-, двух и трехмерной эволюции.

А) Одномерная эволюция. Для решения этой задачи воспользуемся уравнением (9), предполагая, что λ_1 , λ_2 и c - вещественно аналитические функции $|u|$, определенные на полуоси R^1 , разложения в ряд Тейлора которых в окрестности начала координат имеют вид

$$\lambda_1(|u|) = \lambda_{10} + \lambda_{11}|u|^2 + \dots; \quad \lambda_2(|u|) = \lambda_{20} + \lambda_{21}|u|^2 + \dots; \quad c(|u|) = c_0 + c_1|u|^2 + \dots \quad (12)$$

Равенство нулю коэффициентов при первой степени вытекает из аналитичности $\lambda_1(|u|)$, $\lambda_2(|u|)$ и $c(|u|)$; кроме того $\lambda_{10}^2 + \lambda_{20}^2 \neq 0$.

Ограничимся автомодельным решением (9) при выполнении (12), т.е. считаем, что $u(\xi, \tau) = u(\eta)$, $\eta = \xi - v\tau$, где $v = const$. В результате вместо (9) получаем

$$\frac{d^2 u}{d\eta^2} = v(|u|)u; \quad v(|u|) = \frac{c(|u|)}{\lambda_1(|u|) - v^2 \lambda_2(|u|)}. \quad (13)$$

Ищем решение (13) в виде $u(\eta) = a(\eta) \exp(is(\eta))$ и для $a(\eta)$, $s(\eta)$ получаем связанную систему двух нелинейных вещественных уравнений

$$\begin{cases} 2 \frac{ds}{d\eta} \frac{da}{d\eta} + a \frac{d^2 s}{d\eta^2} = 0 \\ \frac{d^2 a}{d\eta^2} - a \left(\frac{ds}{d\eta} \right)^2 = av(a) \end{cases} \quad (14)$$

Решение этой системы известно [6] и записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \eta &= \pm \int_{a_0}^a \left[M - \frac{N^2}{a^2} + 2 \int_{a_0}^a av(a) da \right]^{-1/2} da; \\ s &= s_0 \pm \int_{a_0}^a \left[M - \frac{N^2}{a^2} + 2 \int_{a_0}^a av(a) da \right]^{-1/2} da, \end{aligned} \quad (15)$$

где $N = a^2(0)s'(0)$, $M = [a'(0)]^2 + [s'(0)]^2 a^2(0)$; $s_0 = (0)$. Заметим, что если $a(0) = 0$, то либо $a(\eta) \equiv 0$, либо $s(\eta) \equiv s_0$.

Предполагая, что $|u|$ мало, можно считать, что

$$v(|u|) = \alpha + 2\beta|u|^2, \quad (16)$$

где

$$\alpha = \frac{c_0}{\lambda_{10} - v^2 \lambda_{20}}; \quad \beta = \frac{c_1 \lambda_{10} - c_0 \lambda_{11} (c_0 \lambda_{21} - c_1 \lambda_{20}) v^2}{2(\lambda_{10} - v^2 \lambda_{20})}. \quad (17)$$

При этом v выбираем так, чтобы $\lambda_{10} - v^2 \lambda_{20} \neq 0$.

Рассматривая только ограниченные решения (13) при выполнении (14) - (17) и определенных α , β , a_0 , a'_0 , s_0 и s'_0 , мы получим вблизи МКТ: кинк, солитон, антисолитон, монохроматическую или эллиптическую волну.

Таким образом, вблизи МКТ нелинейные эволюционные процессы, описываемые НЭУ (9), указывают на многообразие эффектов, среди которых имеются такие, которые будут наиболее благоприятствовать самоорганизации макромолекул сплошной биосреды.

Б) Двухмерная эволюция. Исследование этого эволюционного процесса проведем с помощью НЭУ (11) для случая плоской задачи, ограничиваясь поверхностными волнами. Пусть собственная волна, распространяется на плоскости xOy , разделенной осью Oy на две среды: линейную ($x > 0$), в которой волна плотности имеет вид $u = E_0 \exp\{-k_x x + i(k_y y - \omega t)\}$, где E_0 , k_x , k_y , ω - действительные величины, $E_0 > 0$, $k_x > 0$ (т.е. волна затухает при $x \rightarrow \infty$), и нелинейную ($x < 0$), в которой волна эволюционирует в соответствии с уравнением (9). На границе раздела сред выполняются граничные условия

$$\frac{\partial u}{\partial x}(-0, y) = \alpha \frac{\partial U}{\partial x}(+0, y); \quad u(-0, y) = \beta(+0, y), \quad (18)$$

где α , β - положительные константы (в частности, условие $\alpha = \beta = 1$ означает непрерывность поля волны и его нормальной производной на границе раздела сред). Нас интересует, при каких условиях волна распространяется в нелинейной биосреде со спаданием при $x \rightarrow -\infty$, т.е. $\lim_{x \rightarrow -\infty} u(x, y) = 0$.

Исходная волна удовлетворяет линейному волновому уравнению, а в нелинейной среде ее можно записать в виде $u(x, y) = f(x) \exp\{i(k_y y - \omega t)\}$, где для $f(x)$ и учтенных граничных условий получаем задачу Коши

$$f''(x) = f(x) \varphi_1(f^2(x)), \quad f(0) = \beta E_0, \quad f'_0 = -\alpha k_0 E_0, \quad (19)$$

где $\varphi_1(\xi) = k_y^2 - \omega^2 s(\xi) + \varphi(\xi)$.

Анализ задачи Коши (19) показал, что скорость спадания поверхностной плотности среды $u(x, y)$ (в физике такое нелинейное образование называется поляритон) вблизи плоской поверхности раздела асимптотически может быть как экспоненциальной (это характерно для классической дисперсии), так и степенной (дисперсия вблизи МКТ).

В качестве степенного спадания $u(x, y)$ можно рассмотреть случай, когда $\varphi(|u|^2) = 2|u|^2$; $s(|u|^2) = 3|u|^4 + \frac{1}{4} + \frac{1}{c^2}$ (c - скорость распространения). Пусть также $\alpha = \beta = 1$; $\omega = 1$; $k_x = \frac{1}{2}$; $E_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Тогда $\varphi_1(\xi) = 2\xi - 3\xi^2$, т.е. $\varphi(0) = 0$, и решение задачи (19) имеет вид $f(x) = (x^2 + 2x + 2)^{-1/2}$, т.е. при указанных условиях характер спадания плотности среды будет степенным.

Следовательно, в окрестности МКТ для двухмерных самоорганизующихся биосред возможны интенсивные кратковременные резкие изменения концентрации макромолекул в узком плоском слое раздела среды.

В) Трехмерная эволюция. Введем пространственные координаты x , y , z и будем считать, что верхнее полупространство ($z > 0$) - линейная, нижнее ($z < 0$) - нелинейная среды (плоскость xOy - граница раздела сред). Пусть на плоскость xOy из верхнего полупространства падает под углом θ плоская волна концентрации $u_0 = A \exp[i(k_x x + k_z z - \omega t)]$ (считаем, что u_0 не зависит от y ; $k_x = \omega \sin \theta$; $k_z = \omega \cos \theta$; ω - частота; u_0 - удовлетворяет линейному волновому уравнению).

Отраженная волна при $z > 0$ приобретает вид

$$u_+ = A[\exp i(k_x x + k_z z - \omega t) + R \exp i(k_x x - k_z z - \omega t)], \quad (20)$$

где R - коэффициент отражения.

Считаем, что при $z < 0$ преломленная волна u_- эволюционирует согласно (11), причем на границе раздела сред заданы краевые условия

$$\left. \frac{\partial u_-}{\partial z} \right|_{z=0} = \alpha \left. \frac{\partial u_+}{\partial z} \right|_{z=0}; \quad u_-|_{z=0} = \beta u_+|_{z=0}, \quad (21)$$

где α , $\beta = \text{const}$ и $\alpha, \beta > 0$.

Краевая задача (11), (12) не является однозначно разрешенной, т.е. возможны различные реализации преломленной волны. Мы должны выяснить условия, при которых преломленная волна в нелинейной среде может быть плоской, а также вычислить R . Предполагаем, что амплитуда преломленной волны имеет такой же вид как и в случае б) и для $f(z)$ получим уравнение (11), из которого находим, что

$$R = \frac{\rho_0}{\beta A} - 1, \quad (22)$$

где ρ_0 корень уравнения

$$\beta^2 \rho_0^2 (\omega^2 s(\rho_0^2) - \varphi(\rho_0^2) - \omega^2 \sin^2 \theta) = (2\beta A - \rho_0)^2 \alpha^2 \omega^2 \cos^2 \theta. \quad (23)$$

Так как, очевидно, $|R| \leq 1$, для существования плоской преломленной волны, должен существовать хотя бы один корень (23) на отрезке $[0; 2\beta A]$. Если такой корень единственный, то существует единственная реализация плоской волны в нелинейной биосреде.

Итак, в случае трехмерной эволюции в предложенной ситуации коэффициент отражения R может определить процесс самоорганизации макромолекул при воздействии на них плоской волной, отраженной от плоской границы раздела двух сред.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Построенная теория отличается от известных тем, что исследование пространственно-временной самоорганизации нелинейной биосреды макромолекул производится с учетом граничных условий строгими математически обоснованными методами, для чего сам эволюционный процесс потребовалось представить как цепочку взаимосвязанных стационарных линейных явлений, включающих в себя дифракцию волн, пространственно-временную дисперсию среды в регулярных и критических точках спектра. Аналитическая природа МКТ дисперсионных уравнений позволяет еще на линейном уровне феноменологически ввести в рассмотрение характеристики биомолекул, установить правила отбора и, главное, для нелинейной среды построить НЭУ. Законы дисперсии вблизи МКТ и соответствующие им НЭУ описывают локальные дисперсионные и нелинейные эволюционные процессы. Их отличительной чертой является резкое (катастрофическое) изменение дисперсии при малых изменениях несектральных параметров, чему в конфигурационном пространстве отвечают сильное изменение эволюции среды за малый промежуток времени.

Таким образом, наряду с дарвиновской эволюцией, когда за очень длительное время плавное изменение самоорганизации среды приводит к ее структурным перестройкам, вблизи МКТ имеет место резкие изменения в пространственной самоорганизации биомолекул за короткое время. Роль граничных условий при этом является определяющей. Дарвиновская эволюция доказала, что неотъемлемым атрибутом жизни есть информация. Благодаря тому, что в процессе такой эволюции биосреды в состоянии продуцировать, перерабатывать, хранить и транспортировать информацию, создав тем самым генетический код, на нашей планете Земля возникла жизнь. Однако, по-видимому, наряду с дарвиновским эволюционным процессом в создании генетического кода могла возникнуть ситуация, когда определенная его часть появилась за сравнительно малые промежутки времени при эволюционных процессах вблизи МКТ.

О возможном сценарии пространственно-временной эволюции...

Еще в большей степени пространственные свойства эволюции проявляются вблизи МКТ. Здесь за короткое время в биосреде могут произойти структурные изменения, что связано со строением самих биомакромолекул. Если иметь в виду, что макромолекулы имеют киральную природу, то вторым важным условием существования жизни (наряду с генетическим кодом) является сравнительно быстрые эволюционные преобразования биомакромолекул для среды с дисперсией вблизи МКТ.

Теперь на вопрос о том, что такое жизнь, можно было бы ответить: это такое тесное переплетение генетического кода со структурными преобразованиями биомакромолекул вблизи МКТ, которое возможно при соответствующем скейлинге (временные и пространственные масштабы) в самоорганизующихся биомакромолекулах сплошной биосреды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шестопалов В.П. Спектральная теория и возбуждение открытых структур. Киев: Наук.думка, 1987. 288с.
2. Шестопалов В.П. Морсовские критические точки дисперсионных уравнений. Киев: Наук.думка, 1992, 238с.
3. Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул. М.: Мир, 1973, 216с.
4. Эйген М., Шустер П. Гиперцикл - принципы самоорганизации макромолекул. М.: Мир, 1982. 270с.
5. Карнаухов В.Н., Карнаухов А.В. // Биофизика, 1999, т.44., N1, с.147-154.
6. Басс Ф.Г., Вербицкий В.И., Шестопалов В.П. // Докл.АН России, 1994. Т. 338, N4, с.468-473.