

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Брюсселятор — абстрактная химическая реакция?

А.И. Лаврова, Е.Б. Постников, Ю.М. Романовский

Рассматриваются брюсселятор и модель Селькова, описывающая необратимую реакцию гликолиза в режиме автоколебаний. Показано, что эти две различные по построению модели могут быть сведены к одному и тому же обобщённому уравнению Рэля. Исследуются физические основания для такой общности. Обсуждаются преимущества полученного уравнения для качественного и количественного анализа; сходство и различие решений, реализуемых для каждой из двух конкретных моделей в случаях почти гармонических и релаксационных автоколебаний.

PACS numbers: 02.30.Hq, 82.39.-k, 82.40.Bj

DOI: 10.3367/UFNr.0179.200912h.1327

Содержание

1. Введение (1327).
 2. Модели (1328).
2.1. Осциллятор Рэля. 2.2. Брюсселятор. 2.3. Модель Селькова.
 3. Сведение системы уравнений брюсселятора и системы уравнений Селькова к обобщённому уравнению Рэля (1329).
 4. Обсуждение обобщённого уравнения Рэля (1330).
 5. Заключение (1331).
- Список литературы (1332).

1. Введение

Ровно восемьдесят лет назад Андроновым было введено понятие автоколебательных систем [1–3], колебательные процессы в которых, в отличие от колебательных процессов в других диссипативных системах, не требуют для их поддержания периодического воздействия извне. При этом вид автоколебаний зависит от свойств системы, но не зависит от начальных условий. Однако следует отметить, что главная заслуга Андропова состоит в том, что он придал этому понятию чёткое математическое содержание, связав данный тип колебаний с предельными циклами Пуанкаре.

Такие системы к тому времени уже были известны, их основные свойства сформулировал и проанализиро-

вал на физическом уровне строгости несколькими десятилетиями ранее Рэлей [4, 5]. Интерес Рэля к данной тематике был вызван прежде всего задачами теории звука: колебаниями струны при равномерном движении смычка, воздуха в органнх трубах, электро-механического камертона — систем, для которых характерно сосуществование нелинейных процессов, за счёт которых происходит рассеяние и поддержание энергии колебаний.

В дальнейшем подобные механизмы, реализующие "звено обратной связи", получили, начиная с работ Ван дер Поля по ламповому генератору, широкое распространение в радиотехнике и радиофизике, с которыми был тесно связан расцвет теории нелинейных колебаний. В частности, обзор основных результатов в этой области, полученных школой Л.И. Мандельштама, Н.Д. Папалекси и А.А. Андропова, можно найти в [6]. Следует отметить, что именно уравнение Рэля выступило в качестве одной из базисных моделей рассмотренных там задач.

Однако примеры автоколебательных систем не ограничиваются только чисто физическими системами; за последние 40 лет незатухающие осцилляции были обнаружены во многих биофизических и химических системах, например, реакция Белоусова–Жаботинского [7], периодические явления в фотосинтезе [8] и других клеточных метаболических процессах, в частности в гликолизе, колебаниях концентрации кальция [9], нейродинамике [10] и многих других.

Простейшим классическим примером существования автоколебаний в химических реакциях является "брюсселятор", предложенный в 1967 г. Пригожиным и Лефевром [11], которые анонсировали его как модель, описывающую абстрактную тримолекулярную химическую реакцию, но позволяющую наиболее простым и наглядным образом установить качественные типы поведения, совместимые с фундаментальными законами химической и биологической кинетики [12]. Брюсселятор встал в ряд классических моделей автоколебательных систем, таких как уравнения Рэля и Ван дер Поля, применяемых

А.И. Лаврова. Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik, Newtonstraße 15, 12489 Berlin, Germany
E-mail: aurebours@googlemail.com

Е.Б. Постников. Курский государственный университет, физико-математический факультет, ул. Радищева 33, 305000 Курск, Российская Федерация
E-mail: postnicov@gmail.com

Ю.М. Романовский. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Воробьёвы горы, 119992 Москва, Российская Федерация
Тел. (495) 939-26-12. E-mail: yuromanovsky@yandex.ru

Статья поступила 12 августа 2009 г.

в акустике и радиотехнике. Брюсселятор до сих пор продолжает играть роль базовой модели, привлекаемой при рассмотрении уже более сложных ситуаций, включающих в себя стохастические и синхронизационные эффекты, а также тестовой модели для построения математических методов анализа систем с сильной нелинейностью, но не связанной с конкретными химическими процессами [13].

В свою очередь, для описания автоколебаний в реальных химических и метаболических системах развито множество моделей, опирающихся на экспериментально наблюдаемые взаимодействия. В частности, одной из первых стала модель Селькова [14], построенная практически одновременно с брюсселятором в том же 1967 г., описывающая колебания субстратов и продуктов гликолиза — одного из важнейших биохимических путей получения энергии для живых организмов.

Дальнейшее развитие исследований перешло от сосредоточенных динамических систем к распределённым (см., например, результаты, обобщённые в обзорах УФН, посвящённых как общим вопросам приложения теории автоволин к биофизическим системам [15], так и более частным, таким как автоволны в отдельных клетках [16] и клеточных популяциях [17, 18], моделям свертывания крови [19], а также в фундаментальных монографиях [20, 21]). Таким образом, можно сказать, цитируя подзаголовок книги [22], что идеи описания автоколебаний, заложенные в акустике и радиофизике, на протяжении века проложили заметную часть "пути физика в биологию".

В то же время, с методической точки зрения, имеет смысл вернуться к двум ключевым точкам, с которых эта дорога начиналась, — уравнению Рэля, заложившему основу теории автоколебаний в физике, а также моделям Пригожина–Лефевра (брюсселятор) и Селькова, сыгравшим ту же роль в химии, биохимии и биофизике, и рассмотреть их взаимосвязь с современной точки зрения.

Цель настоящих заметок — показать, что две базовые модели химической и биохимической кинетики — брюсселятор и модель Селькова — могут быть сведены к одному и тому же обобщённому уравнению Рэля и все режимы, найденные в модели "брюсселятор" и модели Селькова, могут быть легко и наглядно объяснены с точки зрения классической модели физического осциллятора, а также выявить взаимосвязи между ними, для того чтобы понять, насколько брюсселятор является моделью именно абстрактной химической реакции.

2. Модели

Остановимся на трёх моделях, упомянутых выше. Так как их классическая форма хорошо изучена и подробно описана (см., например, [5, 9, 13, 23]), то далее приводится только краткое представление этих моделей, поясняющее физическую суть и происхождение каждой из них.

2.1. Осциллятор Рэля

Рэлей [5] рассмотрел ситуацию, при которой в системе с трением присутствует внутренний источник энергии, причём сила, с которой он действует на осциллирующий объект, считается малой, т.е. линейной по входя-

щим в уравнения движения переменным — смещению ξ и скорости $\dot{\xi}$. Тогда уравнения движения принимают вид

$$m \frac{d^2 \xi}{dt^2} = -k_0 \frac{d\xi}{dt} - k_1 \xi + k_2 \frac{d\xi}{dt}, \quad (1)$$

где k_0 — коэффициент линейного трения, k_1 — коэффициент упругости, k_2 — коэффициент при составляющей силы, зависящей от скорости. Физически последний член в правой части (1) соответствует силе, передаваемой системе ударом, другими словами путём быстрого сообщения ей дополнительного импульса. Подобная составляющая естественным образом возникает в ряде техник звукоизвлечения из музыкальных инструментов или при поддержании работы часового механизма. Решение такого линейного уравнения при условии $k_2 > k_0$ будет экспоненциально возрастать с течением времени, и в определённый момент скорость перестанет быть малой, т.е. к первому слагаемому в правой части (1) должен добавиться следующий по степени скорости член, направленный противоположно ей, т.е. пропорциональный $\dot{\xi}^3$.

В результате классическое уравнение Рэля принимает вид

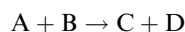
$$\frac{d^2 \xi}{dt^2} + \lambda \frac{d\xi}{dt} + \lambda' \left(\frac{d\xi}{dt} \right)^3 + \Omega^2 \xi = 0. \quad (2)$$

Здесь введены обозначения $\lambda = (k_2 - k_0)/m$, $\Omega^2 = k_1/m$.

Проанализировав (2), Рэлей показал, что в данной системе возможны стационарные колебания, если λ и λ' имеют противоположные знаки. При этом, если λ отрицательна, а λ' — положительна, такие колебания устойчивы. Рэлей также определил (если использовать современную терминологию) радиус предельного цикла этих устойчивых автоколебаний и для стационарного движения по нему нашёл приближённое решение (2) с точностью до третьей гармоники.

2.2. Брюсселятор

Брюсселятор описывает простейшую химическую реакцию преобразования исходных веществ (субстратов) А и В в продукты С и D



как реакцию, состоящую из следующих стадий:



Наиболее нетривиальным шагом в системе (3)–(6) явилось использование промежуточных веществ X и Y, связанных тримолекулярной реакцией (4), обеспечивающей существование колебательного режима. При условии, что продукты необратимо удаляются из сферы реакции, субстраты находятся в избытке и значения констант скоростей реакций равны единице, динамика концентраций промежуточных реагентов описывается

следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= A + x^2y - (B + 1)x, \\ \frac{dy}{dt} &= Bx - x^2y, \end{aligned} \quad (7)$$

x, y — безразмерные концентрации метаболитов реакции, A и B — безразмерные параметры реакции.

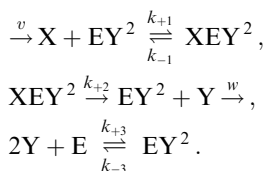
Начиная с исходной статьи [11], авторы брюсселятора подчёркивали, что схема (3)–(6) физически нереалистична из-за тримолекулярного шага (4), однако её структура весьма удобна для обсуждения важных проблем неравновесных процессов при соблюдении простейшего условия включения в реакцию всего двух промежуточных компонентов.

Следует, однако, заметить, что в отличие от обычных химических реакций, в ферментативной кинетике иногда реакция может быть сведена к кубическому виду. Это возможно в том случае, если фермент имеет, по крайней мере, три каталитических центра, способных одновременно фиксировать две молекулы одного вида и одну молекулу другого при условии, что образующиеся промежуточные комплексы распадаются с достаточно большой скоростью и фермент присутствует в небольших количествах. Тогда легко показать, что всю последовательность реакций можно свести к одной стадии, дающей нелинейный член типа x^2y или xy^2 . Простейшим подобным примером является система Селькова.

2.3. Модель Селькова

В отличие от брюсселятора модель Селькова изначально создавалась для описания колебаний в конкретном биохимическом процессе — гликолизе. В частности, модель Селькова описывает первую ключевую стадию гликолиза, которая катализируется ферментом — фосфофруктокиназой.

При условии, что субстрат X поступает в систему с постоянной интенсивностью v , продукт Y удаляется со скоростью w , а свободный фермент E (фосфофруктокиназа) сам по себе не является активным, но способствует образованию тримолекулярных комплексов, данный этап реакции гликолиза может быть представлен в виде схемы



В безразмерных переменных система описывающих реакцию уравнений относительно концентраций может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v - xy^2, \\ \frac{dy}{dt} &= xy^2 - wy. \end{aligned} \quad (8)$$

Видно, что, подобно (7), уравнения (8) содержат кубическую нелинейность, образованную произведением xy^2 , причём в каждое из уравнений системы это произведение входит с разными знаками, но с одинако-

вым единичным коэффициентом. Кроме того, правые части обеих систем уравнений содержат линейное слагаемое только по одной из переменных, а также постоянный член. Всё это вызывает вопрос о том, не существует ли одного уравнения, частными случаями которого при определённом выборе переменных и параметров являются (7) и (8), а если — да, то каков его физический смысл.

3. Сведение системы уравнений брюсселятора и системы уравнений Селькова к обобщённому уравнению Рэлея

Начнём с более простой по форме системы Селькова (8) и перепишем её уравнения в новых переменных. В качестве таких переменных введём суммарную концентрацию реагирующих веществ $z = x + y$ и суммарный поток обмена с окружающей средой $u = v - wy$. Складывая уравнения (8) и подставляя в них z и u , получим следующую систему уравнений:

$$\frac{dz}{dt} = u, \quad (9)$$

$$\frac{du}{dt} = -w(u - v) - w^{-2}(wz + u - v)(u - v)^2,$$

которая описывает динамику общей концентрации реагентов и её обмен с внешней средой.

Система (9) имеет стационарное решение

$$\begin{aligned} u_0 &= 0, \\ z_0 &= \frac{w^2}{v} + \frac{v}{w}, \end{aligned}$$

обладающее прозрачным физическим смыслом: постоянство полной концентрации реагентов соответствует нулевому суммарному потоку.

Для удобства изучения нестационарных процессов введём отклонение от равновесной концентрации $\xi = z - z_0$. Подставляя в (9) новую переменную и группируя подобные члены, получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dt} &= u, \\ \frac{du}{dt} &= -\lambda u - (\lambda'' + \lambda' u) u^2 - [\Omega(1 - \kappa u)]^2 \xi, \end{aligned}$$

которую можно записать в виде одного уравнения второго порядка:

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \lambda \frac{d\xi}{dt} + \lambda'' \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 + \lambda' \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^3 + \Omega^2 \left(1 - \kappa \frac{d\xi}{dt}\right)^2 \xi = 0. \quad (10)$$

Здесь $\lambda = v^2w^{-2} - w$, $\lambda'' = (z_0w - 3v)/w^2$, $\lambda' = w^{-2}$, $\kappa = v^{-1}$, $\Omega = v/\sqrt{w}$.

Уравнение (10), сравнив его с (2), с полным правом можно назвать обобщённым уравнением Рэлея: нелинейность в нём, как и в классическом уравнении Рэлея (2), в отличие, например, от нелинейности в уравнениях Ван дер Поля и Дюффинга, обусловлена только скоростями, а не смещениями. А именно в данном случае в "диссипативной" части (второе, третье и четвёртое слагаемые в левой части уравнения (2)) и появляется разложение по

всем степеням скорости вплоть до третьей, а также проявляется её влияние на частоту свободных колебаний Ω с точностью до первой степени. При этом надо отметить, что параметр $\lambda'' > 0$ определяет асимметрию в положении центра предельного цикла.

Рассмотрим теперь бросселятор (7). Снова введём полную концентрацию веществ $z = x + y$ и переменную $u = A - x$. Подстановка новых переменных и суммирование уравнений системы (7) приводит к системе уравнений

$$\frac{dz}{dt} = u, \quad (11)$$

$$\frac{du}{dt} = A(B + A^2) - (1 + B + 3A^2)u + 3Au^2 - u^3 - (A - u)^2 z.$$

Стационарные точки для (11): $z_0 = (B + A^2)/A$ и $u_0 = 0$. Опять смещаем стационар в начало координат, вводя переменную $\xi = z - z_0$. Подставляя её в (11), группируя и приводя подобные члены, получим

$$\frac{d\xi}{dt} = u, \quad (12)$$

$$\frac{du}{dt} = (B - A^2 - 1)u + \left(2A - \frac{B}{A}\right)u^2 - u^3 - (A - u)^2 \xi.$$

Представляя (12) в виде одного дифференциального уравнения второго порядка, опять приходим к обобщённому уравнению Рэлея (10), коэффициенты которого в данном случае имеют вид $\lambda = (1 + A^2 - B)$, $\lambda' = 1$, $\lambda'' = (B - 2A^2)/A$, $\Omega = A$, $\kappa = A^{-1}$.

Таким образом, обе модели — изначально "абстрактный" бросселятор и система Селькова, описывающая вполне конкретный биохимический процесс, — при соответствующем выборе переменных, достаточно естественном и ясном с точки зрения физики процессов, принимают совершенно идентичную математическую форму. Подобная проблема была затронута в работе [24]. Поэтому анализ обобщённого уравнения Рэлея (10), также достаточно наглядный благодаря форме последнего, даст полную информацию сразу об обеих моделях. Конкретные динамические режимы будут определяться характерными для каждой из задач величинами входящих в (10) постоянных.

4. Обсуждение обобщённого уравнения Рэлея

Проведём краткий анализ уравнения (10), прежде всего, с целью показать, что такая форма записи имеет большие методические преимущества при изучении автоколебаний в классических биохимических системах. Подчёркнём, что такая форма записи предоставляет самый естественный способ линеаризации в окрестности неподвижной точки $\xi = 0$, $\dot{\xi} = 0$: достаточно просто отбросить все слагаемые со степенью выше первой:

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \lambda \frac{d\xi}{dt} + \Omega^2 \xi = 0. \quad (13)$$

Решение уравнения (13)

$$\xi(t) = \xi_0 \exp\left(-\frac{\lambda t}{2}\right) \cos(\omega t + \phi_0),$$

где $\omega = (\Omega^2 - \lambda^2/4)^{1/2}$, ξ_0 , ϕ_0 — начальные амплитуда и фаза, наглядно позволяет определить условие потери

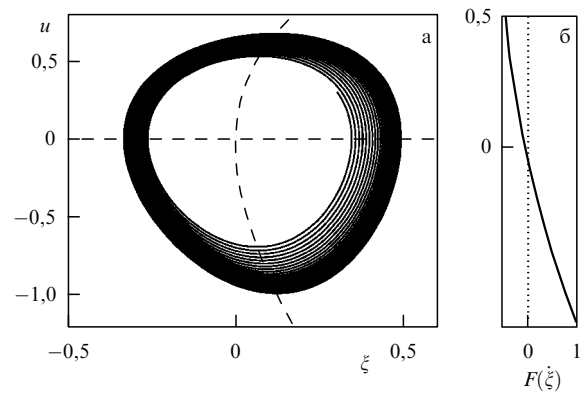


Рис. 1. (а) Фазовый портрет решения системы Селькова в форме обобщённого уравнения Рэлея при $v = 2,8$, $w = 2$. Штриховые линии — нульклины. (б) График значений множителя, обеспечивающего существование автоколебаний, при этих параметрах. $F(\xi) = \lambda + \lambda'' d\xi/dt + \lambda'(d\xi/dt)^2$.

устойчивости неподвижной точки (бифуркации Хопфа): если $\lambda < 0$, то колебания будут экспоненциально возрастать. В противном случае точка останется устойчивой и любые малые отклонения от нуля будут также экспоненциально убывать при $\lambda > 0$. Применительно к модели Селькова точка бифуркации определяется соотношением параметров $v = w\sqrt{w}$, а у бросселятора — $A^2 + 1 = B$.

Более того, столь же естественно вводится и смена типа неустойчивой неподвижной точки: при $\Omega^2 \leq \lambda^2/4$ она меняет свой тип с фокуса (осцилляционное возрастание) на узел (ангармоническое возрастание).

Для демонстрации принципа существования автоколебаний в нелинейном режиме удобно переписать (10) в типичной "автоколебательной" форме:

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \left[\lambda + \lambda'' \frac{d\xi}{dt} + \lambda' \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2\right] \frac{d\xi}{dt} + \Omega^2 \left(1 - \kappa \frac{d\xi}{dt}\right)^2 \xi = 0. \quad (14)$$

Заметим, что нелинейный множитель при Ω^2 всегда неотрицателен вследствие своей квадратичности, так что на условие существования предельного цикла он влияния не оказывает и это условие будет определяться поведением скобки при $\dot{\xi}$ (второе слагаемое в левой части уравнения, обозначенное на рис. 1–3 как $F(\dot{\xi})$). А именно, если $\lambda < 0$, то возрастание величины скорости может привести к изменению знака этого члена и возбуждение колебаний сменится демпфированием. В результате таким образом сформируется движение по устойчивому предельному циклу. Для модели Селькова и бросселятора подобные иллюстрации приведены на рис. 1–3, из которых видно, что при достаточно больших $u = \dot{\xi}$ знак коэффициента перед скоростью совпадает с её знаком, т.е. возможно существование устойчивых периодических движений, которые и демонстрируются на фазовых портретах решений, приведённых на тех же рисунках.

Степенные зависимости также позволяют достаточно легко проводить приближённое решение (10), например, методом Ван дер Поля–Крылова–Боголюбова, так как в этом случае при подстановке гармонических функций их степени легко понижаются, что приводит к набору гармоник, которые могут быть исследованы по отдель-

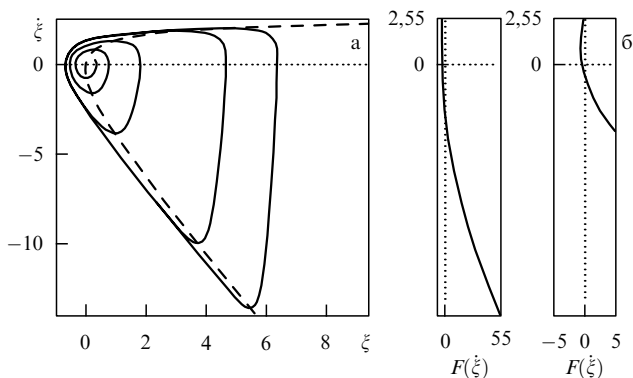


Рис. 2. (а) Фазовый портрет решения системы Селькова в форме обобщённого уравнения Рэлея при $v = 2,55$, $w = 2$. Штриховые линии — нульклина. (б) Графики значений множителя, обеспечивающего существование автоколебаний при этих параметрах.

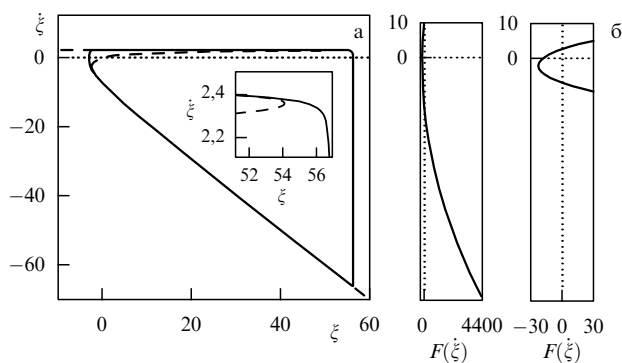


Рис. 3. (а) Фазовый портрет бресселятора в форме обобщённого уравнения Рэлея при $A = 2,55$, $B = 25$; на вставке — его участок вблизи точки срыва релаксационных колебаний. Штриховые линии — нульклина. (б) Графики значений множителя, обеспечивающего существование автоколебаний при этих параметрах.

ности. При этом характерной особенностью, отличающей движение, описываемое обобщённым уравнением Рэлея, от классического, является наличие квадратичного по скорости слагаемого, которое никогда не меняет знак, что приводит к смещению характерного центра предельного цикла. Заметим, что подобный эффект квадратичной нелинейности впервые был проанализирован Рэлеем для случая устойчивых бездиссипативных колебаний [5]. В частности, такой метод даёт высокоточное приближение для аналитического описания выхода на стационар при колебаниях, близких к гармоническим, в решении уравнений Селькова [30]. Этот результат качественно легко объяснить, глядя на фазовый портрет на рис. 1, где предельный цикл близок по форме к эллипсу. В случае бресселятора вблизи бифуркации Хопфа он имеет аналогичный вид.

Различие в поведении этих двух конкретных моделей проявляется при рассмотрении релаксационных колебаний (см. рис. 2 и 3). Оно связано с тем, что физически реализуемые значения параметров приводят к качественно различному виду изоклин $\dot{\xi} = 0$. В случае модели Селькова эта изоклина имеет только один экстремум (см. рис. 2), а у бресселятора возможно наличие двух (см. рис. 3 и вставку на этом рисунке). Второй экстремум появляется при увеличении значения B , которое может быть сколь угодно большим. В этом

случае "автоколебательный диссипативный" член начинает превалировать над "осцилляторным" ($\Omega^2(1 - \kappa\xi)\xi$) и в пределе $B \rightarrow \infty$ колебания описываются классическими методами анализа релаксационных осцилляций как медленные движения по нульклине и быстрые срывы вдоль перпендикуляров, опущенных на неё же из точек экстремума нульклина (см. вставку на рис. 3, где B хотя и конечно, но уже достаточно велико). С методической точки зрения это особенно полезно, так как позволяет легко объяснить свойства бресселятора, переходя к нему при рассмотрении релаксационных колебаний в решениях классического уравнения Рэлея, подробно разобранных в известной книге [25].

Случай модели Селькова менее тривиален, так как в ней отсутствует явный большой параметр и при уменьшении коэффициента скорости поступления субстрата v колебания релаксационного типа порождаются при одновременном стремлении к нулю обоих слагаемых в правой части (14). Поэтому, как это видно из рис. 2, линия быстрых движений на фазовом портрете не вертикальна и нахождение точки срыва для гликолитических колебаний релаксационного типа — более трудная задача.

5. Заключение

Таким образом, обе базовые модели химической и биохимической осцилляционной кинетики, изначально предложенные совершенно независимо на основе различных предположений — об абстрактной минимальной схеме, допускающей существование химических автоколебаний, и максимально упрощённой, но реалистичной по физико-химическим соображениям, — с математической точки зрения представляют собой одно и то же уравнение с точностью до физической интерпретации замены переменных.

Более того, это уравнение является тесно связанным с основополагающим уравнением, описывающим автоколебания в физических системах, — уравнением Рэлея, обобщая его вполне естественным способом. Такая унификация позволяет явно и физически наглядно выделить члены, отвечающие за возбуждение, демпфирование и поддержание осцилляций, причём соответствующий линейный анализ можно провести, не прибегая к каким-либо формальным разложениям, а просто воспользовавшись тем, что дифференциальные уравнения, соответствующие всем трём моделям, сводятся к элементарному уравнению линейного гармонического осциллятора.

Это упрощает также анализ слабо- и сильнонелинейных режимов по сравнению с анализом с помощью стандартных методов, применение которых достаточно громоздко, как это видно, в частности, на примере бресселятора, для которого анализ его квазигармонических и релаксационных предельных циклов проведён в серии статей [26, 27], а также в приближении сильной нелинейности, но достаточно далёкой от режима идеальных релаксационных колебаний — случая, исследованного недавно [28] методом Хе [29]. Последний подход, являющийся дальнейшим обобщением метода Ван дер Поля усреднения по периоду для случая произвольных негармонических функций, представляется особенно перспективным. Это связано с тем, что выведенное обобщённое уравнение Рэлея относится к классу нелинейных уравнений, для которых выполняется условие равенства

среднего по периоду значения одной из переменных (в нашем случае — полного потока) её стационарному значению, что имеет определённую важность в моделировании биофизических процессов (см. [30]).

Рассмотрим принципиальное свойство тех систем, которые могут быть описаны обобщённым уравнением Рэлея. Основной физический смысл уравнения Рэлея — учёт зависимости от высших степеней скорости в "диссипативном коэффициенте" (множителе перед скоростью $d\xi/dt$) и "частоте" (множителе перед смещением от положения равновесия ξ) в случае классического осциллятора, записанного в формальном стандартном виде (14). Поэтому при замене переменных, линеаризующих одно из двух уравнений, необходимо, чтобы новая скорость $d\xi/dt$ была линейной функцией только одной из исходных переменных (x, y), например,

$$\frac{d\xi}{dt} = k_1 x + b_1,$$

где k_1 и b_1 — некие константы относительно u . При этом смещение от положения равновесия ξ является линейной функцией другой переменной: $\xi = k_2 y + b_2$ (что совпадает также с условием, порождающим равенство средних и стационарных значений [30]). Здесь необходимость именно такого условия связана с тем, что реакционный член в моделях рассматриваемого типа имеет вид $x^2 y$ или x^3 и зависимость $d\xi/dt$ от двух переменных не должна приводить к появлению нелинейных по ξ членов в (14).

В заключение следует также сказать, что представление в виде обобщённого уравнения Рэлея служит эффективным теоретическим методом [31], выявляющим механизм нового типа фазовых автоволн в распределённой реакции гликолиза, идущей в плотной среде с экстремально малой диффузией, которые активно экспериментально исследуются в настоящее время [32].

Наконец, можно отметить любопытный факт, что подход, связывающий уравнения биохимической кинетики с уравнением Рэлея, имеет интересный выход и назад в радиофизику: авторы патента [33] разработали генератор нелинейных автоколебаний, основным новшеством которого является перестройка предельного цикла уравнения Рэлея в предельный цикл брюсселятора благодаря введению специфических контуров синхронизации. Данная статья показывает, что подобный эмпирический подход является математически обоснованным и предоставляет возможность задать требуемые дополнительные члены в явном виде.

Brusselator: an abstract chemical reaction?

A.I. Lavrova

Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik, Newtonstraße 15, 12489 Berlin, Germany
E-mail: aurebours@googlemail.com

E.B. Postnikov

Physics and Mathematics Faculty, Kursk State University, ul. Radishcheva 33, 305000 Kursk, Russian Federation
E-mail: postnicov@gmail.com

Yu.M. Romanovsky

Physics Department, M.V. Lomonosov Moscow State University, Vorob'evy gory, 119992 Moscow, Russian Federation
Tel. (7-495) 939-26 12. E-mail: yuromanovsky@yandex.ru

The Brusselator and the Selkov model which describes an irreversible glycolysis reaction in the self-sustained regime are discussed. It is shown that these two differently structured models can be reduced to a single equation, the generalized Rayleigh equation. The physical basis of this reduction is examined. The advantages of the obtained equation as a quantitative and qualitative analysis tool are discussed, as are the similarities and differences of the solutions from the two models for nearly harmonic and relaxation self-oscillations.

PACS numbers: 02.30.Hq, **82.39.-k**, 82.40.Bj

Bibliography — 33 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **179** (12) 1327–1332 (2009)

Список литературы

1. Андронов А А, в кн. *VI съезд русских физиков, Москва, Н. Новгород, Казань, Саратов, 5–16 августа 1928 года* (М.: ГИЗ, 1928) с. 23
2. Andronov A A *C.R. Acad. Sci. Paris* **189** 559 (1929) [Андронов А А *Собрание трудов* (М.: Изд-во АН СССР, 1956) с. 41]
3. Андронов А А *УФН* **93** 329 (1967)
4. Rayleigh, Lord (Strutt J W) *Philos. Mag.* **XV** 229 (1883)
5. Rayleigh, Lord (Strutt J W) *The Theory of Sound* Vol. I (London: Macmillan, 1894)
6. Папалекси Н Д и др. *УФН* **33** 335 (1947)
7. Ванэг В К *УФН* **174** 991 (2004) [Vanag V K *Phys. Usp.* **47** 923 (2004)]
8. Чернавская Н М, Чернавский Д С *УФН* **72** 627 (1960) [Chernavskaya N M, Chernavskii D S *Sov. Phys. Usp.* **3** 850 (1961)]
9. Heinrich R, Schuster S *The Regulation of Cellular Systems* (New York: Chapman&Hall, 1996)
10. Некоркин В И *УФН* **178** 313 (2008) [Nekorkin V I *Phys. Usp.* **51** 295 (2008)]
11. Prigogine I, Lefever R *J. Chem. Phys.* **48** 1695 (1968)
12. Пригожин И *УФН* **131** 185 (1980); Prigogine I *Science* **201** 777 (1978)
13. Трубецков Д И, Мчедлова Е С, Красичков Л В *Введение в теорию самоорганизации открытых систем* (М.: Физматлит, 2005)
14. Sel'kov E E *Eur. J. Biochem.* **479** (1968)
15. Васильев В А, Романовский Ю М, Яхно В Г *УФН* **128** 625 (1979) [Vasil'ev V A, Romanovskii Yu M, Yakhno V G *Sov. Phys. Usp.* **22** 615 (1979)]
16. Романовский Ю М, Теплов В А *УФН* **165** 555 (1995) [Romanovskii Yu M, Teplov V A *Phys. Usp.* **38** 521 (1995)]
17. Иваницкий Г Р, Медвинский А Б, Цыганов М А *УФН* **164** 1041 (1994) [Ivanitskii G R, Medvinskii A B, Tsyganov M A *Phys. Usp.* **37** 961 (1994)]
18. Цыганов М А и др. *УФН* **177** 275 (2007) [Tsyganov M A et al. *Phys. Usp.* **50** 263 (2007)]
19. Атауллаханов Ф И и др. *УФН* **172** 671 (2002) [Ataullakhanov F I et al. *Phys. Usp.* **45** 619 (2002)]
20. Keener J, Sneyd J *Mathematical Physiology* (New York: Springer, 1998)
21. Murray J D *Mathematical Biology* Vol. 1, 2 (New York: Springer, 2002–2003)
22. Blomberg C *Physics of Life: The Physicist's Road to Biology* (Amsterdam: Elsevier, 2007)
23. Боголюбов Н Н, Митропольский Ю А *Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний* 4-е изд. (М.: Наука, 1974) [Bogoliubov N N, Mitropol'skii Yu A *Asymptotic Methods in the Theory of Non-Linear Oscillations* 2nd ed. (New York: Gordon and Breach Sci. Publ., 1961)]
24. Ланда П С *Нелинейные колебания и волны* (М.: Физматлит, 1997)
25. Рабинович М И, Трубецков Д И *Введение в теорию колебаний и волн* (М.: РХД, 2001)
26. Lefever R, Nicolis G *J. Theor. Biol.* **30** 267 (1971)
27. Lavenda R, Nicolis G, Herschkowitz-Kaufman M *J. Theor. Biol.* **32** 283 (1971)
28. Zhang J *Math. Probl. Eng.* **2007** 85145 (2007), doi:10.1155/2007/85145
29. He J-H *Phys. Rev. Lett.* **90** 174301 (2003)
30. Knoke B et al. *Theory Biosci.* **127** 1 (2008)
31. Lavrova A I, Schimansky-Geier L, Postnikov E B *Phys. Rev. E* **79** 057102 (2009)
32. Lavrova A I et al. *BioSystems* **97** 127 (2009)
33. Nagano S, US Patent No. 7,046,095 B2 (2006, May, 16)

DOI: 10.3367/UFN.0179.200912h.1327

Received 12 August 2009

Physics – Uspekhi **52** (12) (2009)