На правах рукописи

ГРОМИК АННА СЕРГЕЕВНА

САМОСБОРКА ЛИНЕЙНЫХ ЦЕПЕЙ

Специальность: 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2008

Работа выполнена на кафедре «Теории управления и динамики машин» Нижегородского государственного университета имени Н.И. Лобачевского

Научный руководитель — кандидат физико-математических наук, доцент
Тай Макс Лазаревич

Научный консультант — доктор физико-математических наук, профессор
Хентов Анатолий Аронович

Официальные оппоненты — доктор физико-математических наук, профессор
Шалфеев Владимир Дмитриевич,

кандидат физико-математических наук, доцент
Леонтович Андрей Михайлович

Ведущая организация — Институт прикладной физики Российской Академии Наук

Защита состоится « 27 » ноября 2008 г. в 15 часов на заседании Диссертационного Совета Д 212.166.13 при Нижегородском Государственном Университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603950, Н.Новгород, пр.Гагарина, д.23.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Нижегородского Государственного Университета им. Н.И.Лобачевского.

Автореферат разослан «25» октября 2008 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук,
доцент — Савельев Владимир Петрович

Общая характеристика работы

Цели и задачи исследования. Объектом исследования диссертационной работы являлось исследование многокомпонентных динамических систем, описывающих различные процессы самосборки линейных цепей с объемными взаимодействиями.

В соответствии с поставленной целью, предметом рассмотрения в диссертационной работе являлись:

- математическое описание марковского процесса самосборки линейных цепей при наличии двух типов ограничителей роста цепей;
- математическое описание процессов самосборки линейных цепей с объемными взаимодействиями вида «конкуренция» и «гиперцикл»;
- исследование соответствующих математических моделей, являющихся нелинейными системами дифференциальных уравнений первого порядка, с помощью методов теории устойчивости и теории нелинейных колебаний;
- разделение моделей самосборки линейных цепей на классы устойчивых и неустойчивых и определение «природы» возникающей неустойчивости состояний равновесия;
- связь моделей самосборки линейных цепей с реальными процессами в развивающихся системах, с целью определения механизмов, порождающих характерные особенности в этих процессах.

Краткая история развития объекта исследования. Математическая модель процессов самосборки была предложена в 1975 году Леонтовичем А.М. в связи с анализом процессов самосборки вирусов, обнаруженной экспериментально. В основе предложенной им модели использовался кинетический подход, широко применяемый в химической кинетике. Далее, в 1979 году, на основе того же кинетического подхода Таем М.Л. была предложена и исследована стохастическая модель марковского процесса самосборки линейных цепей. Под «марковским процессом» понимается, процесс, в котором все взаимодействия между элементами происходят независимо от состояния процесса. Затем, Иржаком В.И. и Таем М.Л., была исследована модель самосборки линейных цепей из элементов одного типа и найден аттрактор соответствующей динамической системы.

В 1989 году Таем М.Л. была предложена модель самосборки с объемными взаимодействиями, в частности, исследовалась модель самосборки отрезков с объемными взаимодействиями. Такие процессы самосборки построены для того, чтобы понять роль достаточно сложных взаимных влияний между компонентами, при которых элементы самосборки способны реагировать на состояние процесса и оказывать воздействие на другие элементы и компоненты. Были получены условия устойчивости и единственности состояния равновесия на интегральном многообразии, а также условия возникновения неустойчивости состояния равновесия и концентрационных автоколебаний.

Актуальность темы исследования обусловлена применимостью математической модели самосборки линейных цепей для описания процессов сополимеризации в химии. Результаты, полученные в ходе исследования динамики многомерных нелинейных динамических систем, также могут иметь самостоятельное значение и быть использованы при анализе других многокомпонентных систем.

Научная новизна. В диссертационной работе впервые исследован марковский процесс самосборки линейных цепей из n элементов с новым видом элементов, предложенных и названных автором «ограничителями роста». Для динамической системы, описывающей процесс самосборки линейных цепей с ограничителями роста, впервые доказано существование $n(n+2)$- мерного интегрального многообразия и приведена его статистическая интерпретация.

Впервые исследованы процессы самосборки линейных цепей из двух типов элементов с объемными взаимодействиями вида «конкуренция» и «гиперцикл». Для соответствующих динамических систем были найдены условия устойчивости и неустойчивости состояний равновесия.

Общие методы исследования. Методическую и теоретическую базу диссертационной работы составляют подходы и принципы синергетики, методы теории устойчивости и теории нелинейных колебаний, а также ряд ранее выполненных работ, связанных с моделированием процессов самоорганизации.

При выполнении исследования автор опирался на теоретические результаты отечественных и зарубежных ученых. Здесь, прежде всего, следует отметить работы Иржака В.И., Кучанова С.И., Леонтовича А.М., Николиса Г., Пригожина И.Р., Тая М.Л., Эйгена М., Шустера П., Флори П. и др.

Достоверность полученных результатов обеспечивается теоретическими положениями, результатами численных экспериментов на ЭВМ, привлечением широкого круга научных работ отечественных и зарубежных исследователей. Все научные положения и выводы диссертационной работы сформулированы в виде теорем и строго математически обоснованны.

Теоретическая и практическая ценность работы. Построенные модели самосборки линейных цепей могут быть использованы в химии как математические модели процессов сополимеризации и процессов с ограничением роста полимерной цепи. Полученные условия устойчивости и единственности состояний равновесия и условия возникновения неустойчивости могут помочь понять закономерности наличия гомеостазиса (условия сохранения устойчивости) и появления неустойчивости в развивающихся системах.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 9 работах (в том числе 3 статьях, 1 из которых опубликована в научных журналах, рекомендованных ВАК), список которых приведен в конце автореферата.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались и обсуждались на VII Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование» (Дубна, 2000 г.), X Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование» (Пущино, 2003 г.), VII Нижегородской сессии молодых ученых (Саров, 2002 г.).

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Главы разбиты на пункты и подпункты. Объем диссертации составляет 112 страниц (не включая списка литературы и приложения). Библиографический список включает 100 наименований.

Содержание и основные результаты диссертации

Во введении описывается краткая история объекта исследования и современное состояние проблемы, определяются цели и задачи исследования, обосновывается их актуальность.

Первая глава носит вспомогательный характер: в ней изложены сведения, необходимые в ходе дальнейшего исследования. Здесь изложено общее представление о самосборке, а также описывается общий кинетический подход для построения математических моделей процессов самосборки. Также кратко излагаются основные результаты, известные для самосборки линейных цепей.

Процесс *самосборки линейных цепей* предполагает наличие «достаточного» числа копий элемента одного или нескольких типов, способных образовывать две связи с любыми двумя другими элементами данных типов, включая элементы того же типа. Будем предполагать, что у нас есть n типов элементов, участвующих в самосборке. После образования связи между элементами появляются *компоненты* или линейные цепи из двух звеньев, составленные из этих элементов. Эти цепи, в дальнейшем при взаимодействии с другими элементами, могут расти до сколь угодно длинных цепей. Последнее предположение о возможности образования бесконечно длинных цепей противоречит тому, что общее число копий элементов всегда ограниченно, хотя и может быть очень большим. Зато это предположение упрощает описание и анализ модели, т.к. позволяет рассматривать соединения цепей независимо от того, сколько в них элементов. Кроме того, предельный переход от конечного к бесконечно большому является известным математическим приемом, широко используемом в различных прикладных задачах.

Будем предполагать, что образовавшиеся связи между элементами цепи не являются «вечными», и при самосборке возможны разрывы в цепях. Это предположение недопустимо для биополимеров таких как ДНК и РНК, но является справедливым для химических полимеров. Однако, если в полученной для химических полимеров модели принять параметры, описывающие разрывы в цепях, равными нулю, то получившаяся модель будет актуальна и для описания биополимеров.

Образования и разрывы связей между элементами в цепях будем считать единственными взаимодействиями, возможными при самосборке линейных цепей, и будем описывать их с помощью *интенсивностей образования* и *разрыва* связей. Интенсивности образования и разрыва связей являются неким аналогом скоростей реакций в химических моделях.

Вторая, третья и четвертая глава содержат основные результаты диссертации.

Во второй главе исследуется динамика марковского процесса самосборки линейных цепей из элементов 1, 2, …, n типов при наличии ограничителей роста двух типов.

В пункте 2.1 дается представление об ограничителях роста. Под «ограничителями роста» понимаются элементы, способные «закрыть» линейную цепь с левого или с правого конца, таким образом, делая её неактивным к дальнейшему образованию связей на этом конце. В реальных процессах гомо и сополимеризации ограничителями могут выступать молекулы, с одновалентными или «неисправными», в силу каких-то обстоятельств, связями.

В исследуемой модели самосборки предполагается, что ограничители бывают двух типов: элементы первого $n+1$ типа могут образовывать одну связь с любым элементом из первых n типов *справа*, а элементы $n+2$ типа - *слева*. Элементы $n+1$ и $n+2$ типа будем называть *ограничителями цепи слева* и *справа* соответственно

<u>В пункте 2.2</u> с помощью кинетического подхода, описанного в 1 главе, строится математическая модель процесса самосборки, которая представляет собой счетную систему нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка. Переменными такой системы являются *концентрации всевозможных компонент*, которые могут образовываться при самосборке из элементов 1,2, …, n типов.

$$\dot{x}(t,\beta) = \sum_{\alpha_i,\ldots,\alpha_j} [x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)q(t,\beta,\alpha_i) - x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)]$$

$$\dot{x}(t,\gamma) = \sum_{\alpha_i,\ldots,\alpha_j} [x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_j,\gamma) - x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)p(t,\alpha_j,\gamma)x(t,\gamma)]$$

$$\begin{aligned}
\dot{x}(t,\alpha_i) = & \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}} \{ (x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_i) + x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_i))q(t,\alpha_{i-1},\alpha_i) - \\
& - (x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}) + x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}))p(t,\alpha_{i-1},\alpha_i)x(t,\alpha_i)\} + \\
& + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m}} \{ (x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m}) + x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m},\gamma))q(t,\alpha_i,\alpha_{i+1}) - \\
& - x(t,\alpha_i)p(t,\alpha_i,\alpha_{i+1})(x(t,\alpha_{i+1},\ldots,\alpha_{i+m}) + x(t,\alpha_{i+1},\ldots,\alpha_{i+m},\gamma))\} + \\
& + x(t,\beta,\alpha_i)q(t,\beta,\alpha_i) - x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i) + x(t,\alpha_i,\gamma)q(t,\alpha_i,\gamma) - \\
& - x(t,\alpha_i)p(t,\alpha_i,\gamma)x(t,\gamma)
\end{aligned}$$

$$\dot{x}(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}}\{(x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_j)-$$

$$-x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_j))q(t,\alpha_{i-1},\alpha_i)-(x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1})+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}))p(t,\alpha_{i-1},\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)\}+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)q(t,\beta,\alpha_i)-x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)+$$

$$+\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m}}\{(x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m})+x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m},\gamma))*$$

$$*q(t,\alpha_j,\alpha_{j+1})-x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)p(t,\alpha_j,\alpha_{j+1})(x(t,\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m})+$$

$$+x(t,\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m},\gamma))\}+x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_j,\gamma)-x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)*$$

$$*p(t,\alpha_j,\gamma)x(t,\gamma)+\sum_{s=i}^{j-1}\{x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_s)p(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})x(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j)-$$

$$-x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)q(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})\}$$

$$\dot{x}(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)=x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)-$$

$$-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)q(t,\beta,\alpha_i)+\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m}}\{(x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m})+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m},\gamma))q(\alpha_j,\alpha_{j+1})-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)*$$

$$*p(t,\alpha_j,\alpha_{j+1})(x(t,\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m})+x(t,\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m},\gamma))\}+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_j,\gamma)-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)p(t,\alpha_j,\gamma)x(t,\gamma)+$$

$$+\sum_{s=i}^{j-1}\{x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_s)p(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})x(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j)-$$

$$-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)q(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})\}$$

$$\dot{x}(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)=\sum_{k=0}^{\infty}\ \sum_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}}\{(x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_j,\gamma)+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_j,\gamma))q(t,\alpha_{i-1},\alpha_i)-(x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1})+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}))p(t,\alpha_{i-1},\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)\}+$$

$$+x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)p(t,\alpha_j,\gamma)x(t,\gamma)-x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_j,\gamma)+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\beta,\alpha_i)-x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)+$$

$$+\sum_{s=i}^{j-1}\{x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_s)p(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})x(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j,\gamma)-$$

$$-x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})\}$$

$$\dot{x}(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)=x(t,\beta)p(t,\beta,\alpha_i)x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)-$$

$$-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\beta,\alpha_j)+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_i)p(t,\alpha_i,\gamma)x(t,\gamma)-$$

$$-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_j,\gamma)+\sum_{s=i}^{j-1}\{x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_s)p(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})*$$

$$*x(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j,\gamma)-x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)q(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})\}$$

$$\alpha_i,\ldots,\alpha_j=1,\ldots,n\quad i,j=1,2,3,\ldots \qquad (1.1),$$

где $\sum\limits_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}}$ обозначает кратное суммирование $\sum\limits_{\alpha_{i-k}=1}^{n}\ \sum\limits_{\alpha_{i-k+1}=1}^{n}\cdots\sum\limits_{\alpha_{i-1}=1}^{n}$.

Аналогично, расшифровывается обозначение $\sum\limits_{\alpha_{j+1},\ldots,\alpha_{j+m}}$.

Система (1.1) определяет оператор динамической системы, который действует на фазовом пространстве:

Ф = { $x(t,\alpha_i)$, $x(t,\beta)$, $x(t,\gamma)$, $x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)$, $x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)$, $x(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)$, $x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)$:$x(t,\alpha_i)$,

$x(t,\beta)$, $x(t,\gamma)$, $x(t,\alpha_i,\dots,\alpha_j)$, $x(t,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j)$, $x(t,\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma)$,

$x(t,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma) > 0$, $\alpha_k = 1, 2, .., n$, $i \le k \le j$ } (1.2).

Условие неотрицательности вытекает из физического смысла концентраций цепей. При $t = 0$ это требование накладывает ограничение на необходимые для решения системы (1.1) начальные условия:

$$x(0,\alpha_i,\dots,\alpha_j) = \mathrm{r}(\alpha_i,\dots,\alpha_j) \ge 0,$$

$$x(0,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j) = \mathrm{r}(\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j) \ge 0,$$

$$x(0,\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma) = \mathrm{r}(\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma) \ge 0,$$

$$x(0,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma) = \mathrm{r}(\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_j,\gamma) \ge 0,$$

$$x(0,\alpha_i) = \mathrm{r}(\alpha_i) > 0,\ x(0,\beta) = \mathrm{r}(\beta) > 0,\ x(0,\gamma) = \mathrm{r}(\gamma) > 0$$

$$\alpha_k = 1, 2, .., n,\ i \le k \le j \qquad (1.3).$$

В пункте 2.3 для полученной динамической системы (1.1) доказываются два утверждения.

Утверждение 1.1. Все решения системы уравнений (1), удовлетворяющие начальным условиям (1.3), неотрицательны при всех $t > 0$.

Это утверждение описывает свойство переменных динамической системы, которым должны обладать «реальные» концентрации линейных цепей.

Утверждение 1.2. Система (1.1) имеет систему $(n + 2)$ первых интегралов:

$$x(t,\beta) + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\alpha_i,\dots,\alpha_{i+m}} \{x(t,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_{i+m}) + x(t,\beta,\alpha_i,\dots,\alpha_{i+m},\gamma)\} = D(\beta)$$

$$x(t,\gamma) + \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_{i-k},\dots,\alpha_i} \{x(t,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_i,\gamma) + x(t,\beta,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_i,\gamma)\} = D(\gamma)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_{i-k},\dots,\alpha_{i-1}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\alpha_{i+1},\dots,\alpha_{i+m}} \{x(t,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_{i+m}) + x(t,\beta,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_{i+m}) +$$

$$+ x(t,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_{i+m},\gamma) + x(t,\beta,\alpha_{i-k},\dots,\alpha_{i+m},\gamma)\} = D(\alpha_i),$$

$$\alpha_i = 1,\dots,n \qquad (1.4),$$

где

$$D(\beta)=x(0,\beta)+\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+m}}\{x(0,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+m})+x(0,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+m},\gamma)\}$$

$$D(\gamma)=x(0,\gamma)+\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_i}\{x(0,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_i,\gamma)+x(0,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_i,\gamma)\}$$

$$D(\alpha_i)=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i-1}}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{i+1},\ldots,\alpha_{i+m}}\{x(0,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i+m})+$$

$$+x(0,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i+m})+x(0,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i+m},\gamma)+ \qquad (1.5)$$

$$+x(0,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{i+m},\gamma)\}$$

являются общими концентрациями элементов каждого типа 1, 2, .. , n + + 2 во всех цепях в начальный момент времени.

Это утверждение также имеет ясный физический смысл и выражает сохранение концентраций каждого элемента в процессе самосборки.

В пункте 2.4 в качестве новых переменных вводятся *концентрации блоков связей*, которые представляют собой общую концентрацию всевозможных цепей, содержащих связанные между собой элементы $\alpha_i, \alpha_{i+1}, \ldots, \alpha_j$ в момент времени t.

$$y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{i-k}\ldots\alpha_{i-1}}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{j+1}\ldots\alpha_{j+m}}\{x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{j+m})+$$

$$+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{j+m})+x(t,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{j+m},\gamma)+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_{j+m},\gamma)\}$$

$$y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{j+1}\ldots\alpha_{j+m}}\{x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m})+x(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+m},\gamma)\}$$

$$y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{\alpha_{i-k}\ldots\alpha_{i-1}}\{x(t,\alpha_{i-1},\ldots,\alpha_j,\gamma)+x(t,\beta,\alpha_{i-k},\ldots,\alpha_j,\gamma)\}$$

$$y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)=x(t,\beta,\alpha_i\ldots\alpha_j,\gamma)$$

$\alpha_k = 1, 2, .., n, \ i \le k \le j$ (1.6).

Утверждение 1.3. Состояния процесса самосборки цепей X (t), описанного с помощью концентраций компонент, и процесса изменения связей между элементами Y (t) взаимооднозначно определяют друг друга при всех $t \ge 0$.

В пункте 2.5 при помощи введенных переменных строится новая математическая модель, также представляющая собой счетную нелинейную систему дифференциальных уравнений первого порядка.

Теорема 1.1. Процесс изменения концентраций связей между элементами в процессе самосборки линейных цепей с двумя ограничителями описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\dot{y}(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j) = \sum_{s=i}^{j-1} \{ y_r(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_s) p(\alpha_s,\alpha_{s+1}) y_l(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j) -$$
$$- q(\alpha_s,\alpha_{s+1}) y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)\}$$

$$\dot{y}(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j) = (D(\beta) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i)) p(\beta,\alpha_i) y_l(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j) -$$
$$- q(\beta,\alpha_i) y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j) + \sum_{s=i}^{j-1} \{ y_r(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_s) p(\alpha_s,\alpha_{s+1}) *$$
$$* y_l(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j) - q(\alpha_s,\alpha_{s+1}) y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)\}$$

$$\dot{y}(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) = y_r(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j) p(\alpha_i,\gamma)(D(\gamma) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\alpha_i,\gamma)) -$$
$$- q(\alpha_i,\gamma) y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) + \sum_{s=i}^{j-1} \{ y_r(t,\ \alpha_i,\ldots,\alpha_s) p(\alpha_s,\alpha_{s+1}) *$$
$$* y_l(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j,\gamma) - q(\alpha_s,\alpha_{s+1}) y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)\}$$

$$\dot{y}(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) = (D(\beta) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i))\,p(\beta,\alpha_i)y_l(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) -$$
$$- q(\beta,\alpha_i)y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) + y_r(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j)\,p(\alpha_j,\gamma)(D(\gamma) -$$
$$- \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\alpha_i,\gamma)) - q(\alpha_i,\gamma)y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma) + \sum_{s=i}^{j-1}\{\, y_r(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_s) *$$
$$* \, p(\alpha_s,\alpha_{s+1})y_l(t,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_j,\gamma) - q(\alpha_s,\alpha_{s+1})y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_j,\gamma)\}$$
$$\alpha_i,\ldots,\alpha_j = 1,\ldots,n \quad i,j = 1,2,3,\ldots \qquad (1.7),$$
где

$$y_l(t, \alpha_i,.., \alpha_j) = y(t, \alpha_i,.., \alpha_j) - \sum_{\alpha_{i-1}=1}^{n} y(t,\alpha_{i-1},\ldots,\alpha_j) - y(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j)$$

$$y_r(t, \alpha_i,.., \alpha_j) = y(t, \alpha_i,.., \alpha_j) - \sum_{\alpha_{j+1}=1}^{n} y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+1}) - y(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma)$$

$$y_l(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j) = y(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j)$$

$$y_r(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j) = y(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j) - \sum_{\alpha_{j+1}=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{j+1}) - y(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma)$$

$$y_l(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma) = y(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma) - \sum_{\alpha_{i-1}=1}^{n} y(t,\alpha_{i-1},\ldots,\alpha_j,\gamma) - y(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma)$$

$$y_r(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma) = y(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma) \qquad (1.8).$$

Концентрации $y_l(t, \alpha_i,.., \alpha_j)$, $y_l(t, \beta, \alpha_i,.., \alpha_j)$, $y_l(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma)$ и $y_r(t, \alpha_i,.., \alpha_j)$, $y_r(t, \beta,\alpha_i,.., \alpha_j)$, $y_r(t, \alpha_i,.., \alpha_j, \gamma)$ выражают общие концентрации последовательно связанных элементов, находящихся соответственно на левом или на правом конце линейных цепей в момент времени t .

Система (1.7) существенно отличается от (1.1) тем, что в правых частях каждого ее уравнения содержится только конечное число слагаемых. Кроме того, введенные в качестве переменных концентрации связей и блоков связей не только упрощают запись системы, но и позволяют «наглядно» описать структуру возникновения связей между элементами в процессе самосборки линейных цепей.

Теорема 1.2. Решения системы (1.7) представляются в квадратурах через решения системы

$$\dot{y}(t,\alpha_i,\alpha_{i+1}) = (D(\alpha_i) - \sum_{\alpha_{i+1}=1}^{n} y(t,\alpha_i,\alpha_{i+1}) - y(t,\alpha_i,\gamma))\, p(\alpha_i,\alpha_{i+1}) \times$$

$$\times (D(\alpha_{i+1}) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\alpha_i,\alpha_{i+1}) - y(t,\beta,\alpha_i)) - q(\alpha_i,\alpha_{i+1}) y(t,\alpha_i,\alpha_{i+1})$$

$$\dot{y}(t,\beta,\alpha_i) = (D(\beta) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i))\, p(\beta,\alpha_i)(D(\alpha_i) - \sum_{\alpha_{i-1}=1}^{n} y(t,\alpha_{i-1},\alpha_i) -$$

$$- y(t,\beta,\alpha_i)) - q(\beta,\alpha_i) y(t,\beta,\alpha_i)$$

$$\dot{y}(t,\alpha_i,\gamma) = (D(\alpha_i) - \sum_{\alpha_{i+1}=1}^{n} y(t,\alpha_i,\alpha_{i+1}) - y(t,\alpha_i,\gamma))\, p(\alpha_i,\gamma)(D(\gamma) -$$

$$- \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\alpha_i,\gamma)) - q(\alpha_i,\gamma) y(t,\alpha_i,\gamma)$$

$$\dot{y}(t,\beta,\alpha_i,\gamma) = (D(\beta) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i))\, p(\beta,\alpha_i)(y(t,\alpha_i,\gamma) - \sum_{\alpha_{i-1}=1}^{n} y(t,\alpha_{i-1},\alpha_i,\gamma) -$$

$$- y(t,\beta,\alpha_i,\gamma)) + (y(t,\beta,\alpha_i) - \sum_{\alpha_{i+1}=1}^{n} y(t,\beta,\alpha_i,\alpha_{i+1}) - y(t,\beta,\alpha_i,\gamma))\, p(\alpha_i,\gamma) *$$

$$* (D(\gamma) - \sum_{\alpha_i=1}^{n} y(t,\alpha_i,\gamma)) - (q(\beta,\alpha_i) + q(\alpha_i,\gamma))\, y(t,\beta,\alpha_i,\gamma)$$

$$\alpha_i,\alpha_{i+1} = 1,\ldots,n \quad i = 1, 2, 3,\ldots \qquad (1.9).$$

В пункте 2.6 для системы (1.7), описывающей изменение концентрации блоков связей, доказывается существование $n(n+2)$- мерного интегрального многообразия.

Теорема 1.3. Динамическая система, оператор которой определяется системой уравнений (7), имеет $n(n + 2)$ мерное интегральное многообразие

$$y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+k}) = D(\alpha_i)\prod_{s=i}^{i+k-1}\frac{y(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})}{D(\alpha_s)}$$

$$y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+k}) = y(t,\beta,\alpha_i)\prod_{s=i}^{i+k-1}\frac{y(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})}{D(\alpha_s)}$$

$$y(t,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+k},\gamma) = y(t,\alpha_{i+k},\gamma)\prod_{s=i}^{i+k-1}\frac{y(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})}{D(\alpha_s)}$$

$$y(t,\beta,\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+k},\gamma) = \frac{y(t,\beta,\alpha_i)y(t,\alpha_{i+k},\beta)}{D(\alpha_i)}\prod_{s=i}^{i+k-1}\frac{y(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})}{D(\alpha_s)} =$$

$$= \frac{y(t,\beta,\alpha_i)y(t,\alpha_{i+k},\beta)}{D(\alpha_{i+k})}\prod_{s=i}^{i+k-1}\frac{y(t,\alpha_s,\alpha_{s+1})}{D(\alpha_s)}$$

$$\alpha_i,\ldots,\alpha_{i+k} = 1,\ldots,n \quad i,k = 1,2,3,\ldots \qquad (1.10)$$

в фазовом пространстве (1.2).

В пункте 2.7 дается статистическая интерпретация найденного интегрального многообразия, а именно: вид найденного многообразия выражает условие независимости связей между взаимодействующими в самосборке элементами, и эта независимость будет сохраняться, если она имеет место в начальный момент времени.

В третьей главе исследуются процессы самосборки линейных направленных и ненаправленных цепей из элементов двух типов с «конкуренцией» между концентрациями связей.

В пункте 3.1 дается представление о *конкуренции* в линейных цепях и рассматриваются ее типы в самосборке линейных цепей.

Под *конкуренцией* в линейных цепях, будем понимать такой тип взаимодействий между элементами самосборки, при котором:

- интенсивность разрыва связей между элементами одной или нескольких компонент линейно зависит от концентрации других компонент

и/или

- интенсивность образования одной или нескольких компонент линейно зависит от концентрации этой (этих) компонент.

Термин конкуренция был введен из-за схожести процесса самосборки с рассмотренным выше типом взаимодействий - с математическими моделями естественного отбора. Действительно, если рассматривать компоненты самосборки как плотность различных видов популяций, а общую концентрацию элементов самосборки – как пищу этих популяций, тогда процесс самосборки с конкуренцией между компонентами будет описывать модель сосуществования нескольких видов, проживающих в одном замкнутом ареале и питающихся одним типом пищи.

Отметим также, что второе условие существования конкуренции в самосборке сродни условию автокатализа, которое заключается в том, что константа скорости появления некоторого вещества увеличивается при увеличении концентрации этого вещества в химической реакции.

Два различных условия существования конкуренции в самосборке дает два различных способа ее моделирования - через интенсивности разрыва и через интенсивности образования связей между элементами.

Отметим, что конкуренция является одним из видов объемных взаимодействий, но отдельное ее исследование позволяет наглядно интерпретировать получаемее результаты.

В пункте 3.2 исследуется влияние конкуренции между гомо и гетеросвязями на самосборку ненаправленных линейных цепей из двух компонент.

Под *самосборкой ненаправленных линейных цепей* понимают такой процесс самосборки цепей, при исследовании которого не важно в какую сторону направлена связь. Иными словами, компоненты вида (1, 2) и вида (2,1) считаются одинаковыми. Если направление связи важно для исследования, то тогда процесс самосборки цепей называют процессом *самосборки с направленными линейными цепями*.

*Гомосвязью б*удем называть связь между элементами одного и того же типа, а связь между элементами разных типов будем называть – *гетеросвязью*. Подобная терминология используется и в химии: например, связи между одинаково и разноименно заряженными ионами, называют гомо и гетерополярными.

Модель марковского процесса самосборки линейных цепей, как было сказано выше, была предложена и исследована Таем М.Л. Им же было найдено интегральное многообразие. В диссертационной работе рассматривается модель самосборки линейных цепей уже с объемными взаимодействиями, но для моделирования таких взаимодействий в рамках уже существующей математической модели достаточно лишь изменить вид интенсивностей образования и разрывов связей. Поэтому, дальнейшее исследование динамики этого процесса будем проводить на найденном для этой модели интегральном многообразии.

В этом случае процесс самосборки линейных цепей в фазовом пространстве

$$\mathbf{\Phi} = \{ (y_{11}, y_{12}, y_{22}) : 0 < y_{11} + y_{12} < D_1 ,\ 0 < y_{12} + y_{22} < D_2 \} \quad (2.1)$$

будет описываться с помощью следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{y}_{11} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})^2 \overline{p}_{11}(1+\alpha_{11}y_{11}) - \overline{q}_{11}(1+\beta_{12}y_{12})y_{11} \\ \dot{y}_{12} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{12}(1+\alpha_{12}y_{12}) - \\ &\quad - \overline{q}_{12}(1+\beta_{11}y_{11} + \beta_{22}y_{22})y_{12} \\ \dot{y}_{22} &= (D_2 - y_{12} - y_{22})^2 \overline{p}_{22}(1+\alpha_{22}y_{22}) - \overline{q}_{22}(1+\beta_{12}y_{12})y_{22} \end{aligned} \quad (2.2),$$

где константы $\overline{p}_{11}$, $\overline{p}_{12}$, $\overline{p}_{22}$, α_{11}, α_{12}, $\alpha_{22} > 0$, $\overline{q}_{11}$, $\overline{q}_{12}$, $\overline{q}_{22}$, β_{11}, β_{12}, $\beta_{22} > 0$.

Теорема 2.1: Если выполняются равенства

$$\begin{aligned} & D_1 = D_2 = D,\ \alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{22} = \alpha ,\ \beta_{11} = \frac{\beta_{12}}{2} = \beta_{22} = \beta , \\ & \overline{p}_{11} = \overline{p}_{12} = \overline{p}_{22} = \overline{p},\ \overline{q}_{11} = \overline{q}_{12} = \overline{q}_{22} = \overline{q} \end{aligned} \quad (2.3),$$

то у системы (2.2) в фазовом пространстве (1.2) существует симметричное состояние равновесия $(\overline{y}, \overline{y}, \overline{y})$, где $0 < \overline{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым, если

$$\alpha\beta < \frac{1}{2\overline{y}^2} \quad (2.4),$$

и неустойчивым при нарушении условия (2.4).

Условия (2.4) автоматически выполнятся при $\alpha = 0$ или $\beta = 0$, и, следовательно, в случае, когда выполнено лишь одно из условий конкуренции. При выполнении обоих условий конкуренции возможно нарушение устойчивости состояния равновесия в том случае, когда коэффициенты α и β достаточно велики.

Итак, аналитически получили, что для возникновения неустойчивости в процессе соперничества между гомо и гетерополимерными структурами необходима достаточно «сильная» конкуренция, выраженная и через интенсивности образования и через интенсивности разрыва связей.

В пункте 3.3 исследуется влияние конкуренции между гомо и гетеросвязями на самосборку направленных линейных цепей из двух компонент и получены схожие с предыдущей моделью результаты.

В этом случае процесс самосборки линейных цепей в фазовом пространстве

Ф=$\{ (y_{11}, y_{12}, y_{21}, y_{22}) : 0 < y_{11} + y_{12}; \; y_{11} + y_{21} < D_1, \; 0 < y_{12} + y_{22};$
$y_{21} + y_{22} < D_2 \}$ (2.5)

описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
\dot{y}_{11} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_1 - y_{11} - y_{21})\overline{p}_{11}(1 + \alpha_{11} y_{11}) - \\
&\quad - \overline{q}_{11}(1 + \beta_{12} y_{12} + \beta_{21} y_{21}) y_{11} \\
\dot{y}_{12} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{12}(1 + \alpha_{12} y_{12}) - \\
&\quad - \overline{q}_{12}(1 + \beta_{11} y_{11} + \beta_{22} y_{22}) y_{12} \\
\dot{y}_{21} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_1 - y_{11} - y_{21})\overline{p}_{21}(1 + \alpha_{21} y_{21}) - \\
&\quad - \overline{q}_{21}(1 + \beta_{11} y_{11} + \beta_{22} y_{22}) y_{21} \\
\dot{y}_{22} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{22}(1 + \alpha_{22} y_{22}) - \\
&\quad - \overline{q}_{22}(1 + \beta_{12} y_{12} + \beta_{21} y_{21}) y_{22}
\end{aligned} \qquad (2.6),$$

где константы $\overline{p}_{11}$, $\overline{p}_{12}$, $\overline{p}_{21}$, $\overline{p}_{22}$, α_{11}, α_{12}, α_{21}, $\alpha_{22} > 0$, $\overline{q}_{11}$, $\overline{q}_{12}$, $\overline{q}_{21}$, $\overline{q}_{22}$, β_{11}, β_{12}, β_{21}, $\beta_{22} > 0$.

Теорема 2.2: Если выполняются равенства

$$D_1 = D_2 = D,\ \alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha_{22} = \alpha,\ \beta_{11} = \beta_{12} = \beta_{21} = \beta_{22} = \beta,$$
$$\bar{p}_{11} = \bar{p}_{12} = \bar{p}_{22} = \bar{p}_{21} = \bar{p},\ \bar{q}_{11} = \bar{q}_{12} = \bar{q}_{22} = \bar{q}_{21} = \bar{q} \qquad (2.7),$$

то у системы (2.6) в фазовом пространстве (2.5) существует симметричное состояние равновесия $(\bar{y}, \bar{y}, \bar{y}, \bar{y})$, где $0 < \bar{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым, если

$$\alpha\beta < \frac{1}{2\bar{y}^2} \qquad (2.8),$$

и неустойчивым при нарушении условия (2.8).

Теорема 2.3: Если выполняются равенства

$$D_1 = D_2 = D,\ \alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_1,\ \alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha_2,$$
$$\beta_{11} = \beta_{22} = \alpha_1,\ \beta_{12} = \beta_{21} = \beta_2,$$
$$\bar{p}_{11} = \bar{p}_{22} = \bar{p}_1,\ \bar{p}_{12} = \bar{p}_{21} = \bar{p}_2,\ \bar{q}_{11} = \bar{q}_{22} = \bar{q}_1,\ \bar{q}_{12} = \bar{q}_{21} = \bar{q}_2 \qquad (2.9),$$

то у системы (2.6) в фазовом пространстве (2.5) существует квазисимметричное состояние равновесия $(\bar{y}_1, \bar{y}_2, \bar{y}_2, \bar{y}_1)$, где $0 < \bar{y}_1 + \bar{y}_2 < D$.

В пункте 3.4 исследуется влияние конкуренции за направление на динамику самосборки направленных линейных цепей из элементов двух типов.

Под «*конкуренцией за направление*» будем понимать конкуренцию между концентрациями гетеросвязей $y_{12}(t)$ и $y_{21}(t)$. Образно еще можно назвать конкуренцией между «правшами» и «левшами».

В этом случае процесс самосборки линейных цепей в фазовом пространстве (2.5) описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$
\begin{aligned}
\dot{y}_{11} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_1 - y_{11} - y_{21})\,p_{11} - q_{11}y_{11} \\
\dot{y}_{12} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\,\overline{p}_{12}(1+\alpha_{12}\,y_{12}) - \\
&\quad - q_{12}y_{12}(1+\beta_{21}y_{21}) \\
\dot{y}_{21} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_1 - y_{11} - y_{21})\,\overline{p}_{21}(1+\alpha_{21}\,y_{21}) - \\
&\quad - q_{21}y_{21}(1+\beta_{12}y_{12}) \\
\dot{y}_{22} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_2 - y_{12} - y_{22})\,p_{22} - q_{22}y_{22}
\end{aligned}
\qquad (2.10),
$$

где константы $p_{11}, \overline{p}_{12}, \overline{p}_{21}, p_{22}, \alpha_{12}, \alpha_{21}, q_{11}, \overline{q}_{12}, \overline{q}_{21}, q_{22}, \beta_{12}, \beta_{21} > 0$.

Теорема 2.4: Если выполняются равенства

$$
\begin{aligned}
&D_1 = D_2 = D, \quad \alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha, \quad \beta_{12} = \beta_{21} = \beta, \\
&p_{11} = p_{22} = p_1, \quad \overline{p}_{12} = \overline{p}_{21} = \overline{p}_2, \\
&q_{11} = q_{22} = q_1, \quad \overline{q}_{12} = \overline{q}_{21} = \overline{q}_2
\end{aligned}
\qquad (2.11),
$$

то у системы (2.10) в фазовом пространстве (2.5) существует квазисимметричное состояние равновесия $(\overline{y}_1, \overline{y}_2, \overline{y}_2, \overline{y}_1)$, где $0 < \overline{y}_1 + \overline{y}_2 < D$, которое будет устойчивым при

$$\alpha\,\beta < \frac{1}{(\overline{y}_2)^2} \quad (2.12)$$ и неустойчивым при

$$\alpha\,\beta > \frac{1}{(\overline{y}_2)^2} \quad \text{и} \quad \frac{\alpha\,\beta(\overline{y}_2)^2 - 1}{\overline{y}_2(1+\alpha\,\overline{y}_2)(1+\beta\,\overline{y}_2)} > \frac{2}{(D - \overline{y}_1 - \overline{y}_2)} > \frac{2}{D} \qquad (2.13).$$

Видим, что, как и для предыдущих двух моделей, для возникновения неустойчивости в самосборке линейных цепей необходима достаточно «сильная» конкуренция за направление между компонентами самосборки .

Полученные результаты могут послужить отправной точкой для объяснения преобладания правой ассимметрии в природе, в двойной спирали ДНК и α-спиралях глобулярных белков.

Четвертая глава посвящена изучению математических моделей гиперциклов взаимодействий между компонентами в самосборке линейных направленных и ненаправленных цепей из элементов двух типов.

В пункте 4.1 дается представление о гиперцикле взаимодействий в самосборке линейных цепей. Термин *гиперцикл* был предложен Эйгеном М., для обозначения циклических взаимодействий в самопроизводящих системах.

Гиперцикл предполагает наличие конечного числа компонент (не менее трех) взаимодействующих между собой. В рассмотренных в данной работе моделях гиперциклов, в качестве таких компонент выступают концентрации блоков связей линейных цепей. К сожалению, из-за допущения, что длина линейной цепи неограниченна, концентрации компонент и концентрации связей не могут выступить в качестве составляющих цикла.

В пункте 4.2 исследуется влияние гиперциклов взаимодействий на динамику процесса самосборки ненаправленных линейных цепей из элементов двух типов. При этом предполагается, что гиперциклы бывают двух типов: гиперцикл конкуренции и гиперцикл содружества.

Будем говорить, что в самосборке присутствует **гиперцикл конкуренции**, если между концентрациями всех блоков связей существуют циклические взаимодействия, выраженные через интенсивности разрыва связей. А именно: рост концентраций $y_{11}(t)$ приводит к увеличению разрыва связей (1, 2), а рост концентраций $y_{12}(t)$ увеличивает разрыв связей (2, 2), рост концентрации которых в свою очередь приводит к увеличению разрыва связей (1, 1).

Отметим, что гиперцикл конкуренции имеет существенное отличие от «классического» гиперцикла Эйгена. В «классическом» гиперцикле компоненты гиперцикла участвуют в синтезе друг друга, а гиперцикл конкуренции заключается в обратном – компоненты гиперцикла участвуют в «разрушении» друг друга. То есть, в самосборке устанавливаются конкурирующие взаимодействия между концентрациями связей, только эти взаимодействия имеют замкнутую (циклическую) структуру.

Рассмотрим в самосборке ненаправленных линейных цепей «классический» гиперцикл между концентрации всех блоков связей. А именно: пусть рост концентраций $y_{11}(t)$ приводит к росту концентраций $y_{12}(t)$, а рост концентраций $y_{12}(t)$ ведет к росту концентраций $y_{22}(t)$, рост концентрации которых в свою очередь приводит к увеличению концентраций связей $y_{11}(t)$. Назовем такие взаимодействия **ги-**

перциклом содружества, по аналогии с теми взаимодействиями, которые он устанавливает, и чтобы различать их с гиперциклом конкуренции.

В случае, когда в самосборке ненаправленных линейных цепей присутствуют и гиперцикл конкуренции, и гиперцикл содружества, в фазовом пространстве (1) процесс самосборки будет описываться с помощью следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\dot{y}_{11} = (D_1 - y_{11} - y_{12})^2 \overline{p}_{11}(1+\alpha_{22}y_{22}) - \overline{q}_{11}(1+\beta_{22}y_{22})y_{11}$$
$$\dot{y}_{12} = (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{12}(1+\alpha_{11}y_{11}) - \overline{q}_{12}(1+\beta_{11}y_{11})y_{12}$$
$$\dot{y}_{22} = (D_2 - y_{12} - y_{22})^2 \overline{p}_{22}(1+\alpha_{12}y_{12}) - \overline{q}_{22}(1+\beta_{12}y_{12})y_{22}$$
(3.1),

где константы $\overline{p}_{11}$, $\overline{p}_{12}$, $\overline{p}_{22}$, α_{11}, α_{12}, $\alpha_{22} > 0$, $\overline{q}_{11}$, $\overline{q}_{12}$, $\overline{q}_{22}$, β_{11}, β_{12}, $\beta_{22} > 0$.

Теорема 3.1: Если выполняются

$$D_1 = D_2 = D,\ \alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{22} = \alpha,\ \beta_{11} = \beta_{12} = \beta_{22} = \beta,$$
$$\overline{p}_{11} = \overline{p}_{12} = \overline{p}_{22} = \overline{p},\ \overline{q}_{11} = \overline{q}_{12} = \overline{q}_{22} = \overline{q}$$
(3.2),

то у системы (3.1) в фазовом пространстве (2.1) существует симметричное состояние равновесия $(\overline{y}, \overline{y}, \overline{y})$, где $0 < \overline{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым при любых $\alpha, \beta \geq 0$.

Этот результат сохранится и случае, когда гиперцикл конкуренции и гиперцикл содружества не совпадают по направлению, а именно для системы

$$\dot{y}_{11} = (D_1 - y_{11} - y_{12})^2 \overline{p}_{11}(1+\alpha_{22}y_{22}) - \overline{q}_{11}(1+\beta_{12}y_{12})y_{11}$$
$$\dot{y}_{12} = (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{12}(1+\alpha_{11}y_{11}) - \overline{q}_{12}(1+\beta_{22}y_{22})y_{12}$$
$$\dot{y}_{22} = (D_2 - y_{12} - y_{22})^2 \overline{p}_{22}(1+\alpha_{12}y_{12}) - \overline{q}_{22}(1+\beta_{11}y_{11})y_{22}$$
(3.3)

и будет справедлива следующая

Теорема 3.2: Если выполняются равенства (3.2), то у системы (3.3) в фазовом пространстве (2.1) существует симметричное состояние равновесия $(\bar{y}, \bar{y}, \bar{y})$, где $0 < \bar{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым при любых $\alpha, \beta \geq 0$.

Когда в самосборке присутствует только гиперцикл конкуренции ($\alpha = 0$, $\beta > 0$), в отличие от обычной конкуренции, при росте параметров взаимодействий не происходит смены устойчивости состояния равновесия. Таким образом, в самосборке линейных ненаправленных цепей с помощью гиперцикла удается поддерживать «оптимальную» конкуренцию между концентрациями связей, когда «преимущество одних не идет в ущерб другим».

В пункте 4.3 исследуется влияние гиперциклов взаимодействий на динамику процесса самосборки направленных линейных цепей из элементов двух типов и получены схожие с предыдущей моделью результаты.

В этом случае процесс самосборки линейных цепей в фазовом пространстве (2.5) описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
\dot{y}_{11} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_1 - y_{11} - y_{21})\bar{p}_{11}(1+\alpha_{22}y_{22}) - \bar{q}_{11}(1+\beta_{22}y_{22})y_{11} \\
\dot{y}_{12} &= (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\bar{p}_{12}(1+\alpha_{11}y_{11}) - \bar{q}_{12}(1+\beta_{11}y_{11})y_{12} \\
\dot{y}_{21} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_1 - y_{11} - y_{21})\bar{p}_{21}(1+\alpha_{12}y_{12}) - \bar{q}_{21}(1+\beta_{12}y_{12})y_{21} \\
\dot{y}_{22} &= (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_2 - y_{12} - y_{22})\bar{p}_{22}(1+\alpha_{21}y_{21}) - \bar{q}_{22}(1+\beta_{21}y_{21})y_{22}
\end{aligned} \quad (3.4),$$

где константы $\bar{p}_{11}, \bar{p}_{12}, \bar{p}_{21}, \bar{p}_{22}, \alpha_{11}, \alpha_{12}, \alpha_{21}, \alpha_{22} > 0$, $\bar{q}_{11}$, $\bar{q}_{12}, \bar{q}_{21}, \bar{q}_{22}, \beta_{11}, \beta_{12}, \beta_{21}, \beta_{22} > 0$.

Теорема 3.3: Если выполняются равенства

$$D_1 = D_2 = D,\ \alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha_{22} = \alpha,\ \beta_{11} = \beta_{12} = \beta_{21} = \beta_{22} = \beta,$$
$$\bar{p}_{11} = \bar{p}_{12} = \bar{p}_{22} = \bar{p}_{21} = \bar{p},\ \bar{q}_{11} = \bar{q}_{12} = \bar{q}_{22} = \bar{q}_{21} = \bar{q} \quad (3.5),$$

то у системы (3.4) в фазовом пространстве (2.5) существует симметричное состояние равновесия $(\bar{y}, \bar{y}, \bar{y}, \bar{y})$, где $0 < \bar{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым при всех $\alpha, \beta \geq 0$.

Аналогичный результат получен для различающихся по направлению циклических взаимодействий:

$$\dot{y}_{11} = (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_1 - y_{11} - y_{21})\overline{p}_{11}(1 + \alpha_{22}y_{22}) - \overline{q}_{11}(1 + \beta_{12}y_{12})y_{11}$$
$$\dot{y}_{12} = (D_1 - y_{11} - y_{12})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{12}(1 + \alpha_{11}y_{11}) - \overline{q}_{12}(1 + \beta_{21}y_{21})y_{12}$$
$$\dot{y}_{21} = (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_1 - y_{11} - y_{21})\overline{p}_{21}(1 + \alpha_{12}y_{12}) - \overline{q}_{21}(1 + \beta_{22}y_{22})y_{21}$$
$$\dot{y}_{22} = (D_2 - y_{21} - y_{22})(D_2 - y_{12} - y_{22})\overline{p}_{22}(1 + \alpha_{21}y_{21}) - \overline{q}_{22}(1 + \beta_{11}y_{11})y_{22} \quad (3.6)$$

Теорема 3.4: Если выполняются равенства (3.5),то у системы (3.6) в фазовом пространстве (2.5) существует симметричное состояние равновесия $(\overline{y}, \overline{y}, \overline{y}, \overline{y})$, где $0 < \overline{y} < \frac{D}{2}$, которое будет устойчивым при всех $\alpha, \beta \geq 0$.

Результаты доказанных в пунктах 4.2 и 4.3 теорем перекликаются с результатами, полученных Эйгеным М. и Шустером П. для общих моделей гиперциклов. Так же как и в работах этих авторов, в случае гиперцикла у системы существует только одно устойчивое состояние равновесия.

В заключение работы вынесены общие выводы по результатам диссертации.

В приложение вынесены графики фазовых портретов, исследуемых в работе динамических систем, построенных с помощью ЭВМ в программном пакете WInSet v. 3.0.2.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

- математическое описание марковского процесса самосборки линейных цепей при наличии двух типов ограничителей роста цепей;
- математическое описание процессов самосборки линейных цепей с объемными взаимодействиями вида «конкуренция» и «гиперцикл»;
- доказательство существования *n(n+2)*- мерного интегрального многообразия для динамической системы, описывающей марковский процесс самосборки линейных цепей с двумя типами ограничителей роста
- полученные аналитически условия устойчивости и единственности состояний равновесия и условия возникновения неустойчивости состояний равновесия для динамических систем, описывающих процессы самосборки линейных цепей с объёмными взаимодействиями видов «конкуренция» и гиперцикл»;
- результаты, полученные в ходе численных экспериментов на ЭВМ.

Публикации. По теме диссертации опубликованы следующие статьи и материалы, в том числе в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Мартынова (Громик) А.С. Конкуренция в самосборке линейных цепей // Вестник ННГУ, 2007. Выпуск 2. Стр. 186-191.

в других изданиях:

2. Мартынова (Громик) А.С., Тай М.Л. Математическая модель процесса самосборки однородных цепей с одним ограничителем. // Сб. трудов VII международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». Дубна, 2000. Том 2. Стр.490-497.
3. Мартынова (Громик) А.С. Конкуренция в самосборке линейных цепей // Сб. трудов XI международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». Под общ. редакц. Г.Ю. Ризниченко, Ижевск: Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2004. Том 2. Стр. 837-843.
4. Мартынова (Громик) А.С., Тай М.Л. Математическая модель процесса самосборки однородных цепей с одним ограничителем. //Тезисы VII Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». Москва, 1999. С. 224.

5. Мартынова (Громик) А.С., Тай М.Л. Самосборка линейных цепей с ограничителями роста. // Тезисы семинара «Нелинейное моделирование и управление». Самара, 2000. Стр. 82-83.
6. Мартынова (Громик) А.С. Динамика самосборки линейных цепей при наличии ограничителей роста. // «Вычислительная математика и кибернетика 2000»: Тез. докл. конф., посвященной 80-летию Ю.И. Неймарка. Н.Новгород, ННГУ, 2000. С. 57.
7. Мартынова (Громик) А.С. Процесс самосборки линейных цепей при наличии ограничителей роста // Тезисы докладов VIII Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». – Москва, 2001. С. 221.
8. Мартынова (Громик) А.С. Динамика процессов самосборки с объёмными взаимодействиями. //Тезисы докладов VII Нижегородской сессии молодых ученых (математические науки). – Саров, 2002. Стр. 57-58.
9. Мартынова (Громик) А.С. Динамика процессов самосборки с объемными взаимодействиями. //Тезисы докладов X Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». – Пущино, 2003. С. 216.

---

* В приведенном списке работ автор публикуется под девичьей фамилией Мартынова.

* В работах [2] [4], [5] Таю М.Л. принадлежит формулировка и постановка задачи, а Громик (Мартыновой) А.С. – полученные в ходе исследования результаты.

Подписано в печать 02.10.2008. Формат 60x84 1/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная.
Уч. – изд. л. 1,0. Заказ № 601. Тираж 100 экз.

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии
Нижегородского государственного технического
университета им. Р.Е. Алексеева.
603950, г. Н. Новгород, ул. Минина, 24