Узагальнення систем рівнянь хемотаксису та Ван дер Ваальса на випадок тривимірного векторного поля

Микола І. СЄРОВ [1], *Юрій Г. ПОДОШВЕЛЕВ* [1],
Тамара О. КАРПАЛЮК [2], *Олександр А. ВОЛОШИН* [3]

[1)] *Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка, Україна*
E-mail: *mserov4@gmail.com*, *optimist1618@gmail.com*

[2)] *НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна*
E-mail: *karpaliuk.tamara@lll.kpi.ua*

[3)] *Інститут математики НАН України, Київ, Україна*
E-mail: *voloshyn@imath.kiev.ua*

Розповсюдження бактеріальних популяційних хвиль у вигляді кілець хемотаксису є важливим біологічним явищем. Воно характеризує спрямований рух бактерій у відповідь на зміни хімічних сигналів у навколишньому середовищі. Кільцева структура хемотаксису виникає, коли бактерії, особливо в великих популяціях, утворюють впорядковані зони руху у вигляді концентричних кілець — результат їх колективної реакції на просторові градієнти атрактантів або репелентів. Такі патерни дозволяють дослідникам вивчати адаптацію бактерій до умов середовища, механізми взаємодії між клітинами за обмежених ресурсів або у присутності токсичних речовин, а також питання розподілу ресурсів і оптимізації виживання в екологічних системах.

Хемотаксис — процес, за допомогою якого бактерії переміщуються у напрямку до або від певних хімічних речовин; він може бути позитивним (приваблення) або негативним (відштовхування). На рівні популяцій це проявляється у вигляді популяційних хвиль — узгодженого руху бактерій у формі фронтів або кілець. Популяційні хвилі виникають завдяки здатності клітин координувати свої рухи у відповідь на зміну концентрації хімічних сигналів і можуть періодично змінювати інтенсивність та форму.

Найпоширенішою формою хемотаксисних патернів є концентричні кільця: бактерії рухаються в бік хімічного градієнта й утворюють кільцеподібні зони підвищеної щільності, які розширюються або деформуються з часом. У лабораторних експериментах кільця з'являються поблизу джерел поживних речовин і дозволяють простежити взаємодію між рухом клітин і споживанням субстрату. У складніших або неоднорідних умовах спостерігаються також розгалуження, переплетення, закручування або спіралі — ці форми виникають, коли клітини змінюють напрямок руху внаслідок локальних змін градієнтів або коли середовище має особливі фізичні властивості (наприклад, турбулентність).

Динаміка хвиль характеризується тим, що групи бактерій одночасно реагують на зміни концентрації хімічних речовин, формуючи хвилі або кільця з періодичними змінами в амплітуді та інтенсивності, які змінюються внаслідок еволюції хімічного середовища.

У сучасних біофізичних дослідженнях симетричне розповсюдження бактеріальних популяційних хвиль — випадки, коли кільця зберігають чітко окреслену форму та поширюються зі швидкістю, що залежить від рухливості бактерій і їхніх хемотаксичних властивостей — успішно описуються математичними моделями на основі рівнянь Келлера–Зегеля. Класична форма цієї моделі має вигляд

$$\begin{aligned} S_t &= D_S S_{xx} + k_1 g(S) b, \\ b_t &= -V(b\chi(S)S_x)_x + D_b b_{xx} + k_2 g(S) b, \end{aligned} \tag{1}$$

де $S = S(t,x)$ — концентрація субстрату–атрактанта, який споживається бактеріями, $b = b(t,x)$ — щільність бактерій, $g = g(S)$ — питома швидкість росту бактерій. $\chi = \chi(S)$ —

функція хемотаксичної відповіді, D_S та D_b — коефіцієнти дифузії субстрату–атрактанта й бактерій відповідно, V, k_1, k_2 — довільні сталі, t, x — часова та просторова незалежні змінні. При відповідному виборі функцій і параметрів модель Келлера–Зегеля відтворює широкий спектр поведінки: від утворення стійких концентричних кілець до складних хвильових патернів, включно з кільцевими утвореннями типу Адлера.

Крім класичної моделі, кооперативну поведінку мікроорганізмів описують також узагальнені реактивно–конвективні системи. Один із загальних виглядів таких систем

$$U_t = \partial_x \left[\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ f(u^1)u^2 & \lambda_2 \end{pmatrix} U_x + G(U) \right] + H(U), \tag{2}$$

де $U = \binom{u^1}{u^2} \in \mathbb{R}^2$, $u^1(t,x)$ — концентрація субстрату-атрактанта, $u^2(t,x)$ — щільність бактерій, $f(u^1)$ — функція хемотаксичної відповіді, λ_1, λ_2 — коефіцієнти дифузії. Тут

$$G(U) = \begin{pmatrix} g^1(u^1,u^2) \\ g^2(u^1,u^2) \end{pmatrix} \quad \text{і} \quad H(U) = \begin{pmatrix} h^1(u^1,u^2) \\ h^2(u^1,u^2) \end{pmatrix}$$

відповідно задають нелінійні коефіцієнти конвективної та реактивної взаємодії бактерій і субстрату.

Оскільки процеси хемотаксису узгоджуються з принципом відносності Галілея, природно вимагати, щоб і система рівнянь (2) була інваріантною відносно алгебри Галілея та її розширень. У роботі [1] показано, що система (2) є інваріантною відносно узагальненої алгебри Галілея $\mathrm{AG}_2(1,1)$ тоді й лише тоді, коли вона набуває спеціального вигляду

$$U_t = \partial_x \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2\frac{u^2}{u^1} & \lambda \end{pmatrix} U_x + \begin{pmatrix} m_1(u^1)^2 \\ m_2(u^2)^2 \end{pmatrix} \right] + \begin{pmatrix} n_1 u^1 \\ n_2 u^2 \end{pmatrix} (u^2)^2, \tag{3}$$

де λ, m_1, m_2, n_1, n_2 — довільні сталі. Узагальнена алгебра Галілея задається базисними генераторами

$$\partial_t,\ \partial_x,\ G = t\partial_x + xQ_1,\ Q_1,\ D = 2t\partial_x + x\partial_x + Q_2,\ \Pi = t^2\partial_t + tx\partial_x + \frac{x^2}{2}Q_1 + tQ_2. \tag{4}$$

де

$$Q_1 = -\frac{1}{2}u^1\partial_{u^1}, \quad Q_2 = -\frac{1}{2}u^1\partial_{u^1} - u^2\partial_{u^2}.$$

У роботі [1] для випадку $m_1 = n_2 = 0$ за допомогою заміни Коула–Хопфа

$$t = t, \quad x = x, \quad \frac{u^1_x}{u^1} = v^1, \quad u^2 = v^2, \tag{5}$$

де $v^a = v^a(t,x)$ — нові невідомі функції, систему рівнянь (3) було зведено до системи рівнянь Ван дер Ваальса

$$\begin{aligned} v^1_t &= v^1_{xx} + \partial_x[(v^1)^2 + n_1(v^2)^2], \\ v^2_t &= \lambda v^2_{xx} + \partial_x[2v^1v^2 + m_2(v^2)^2]. \end{aligned} \tag{6}$$

Система рівнянь (6) широко використовується в молекулярно-кінетичній теорії газів і рідин. У фізиці часто розглядають ідеальний газ, де молекули вважаються точками без взаємодії; проте для реальних умов (високий тиск, низькі температури) необхідно враховувати взаємодії і об'єм молекул — саме це враховує рівняння Ван дер Ваальса.

У роботі [1] встановлено, що MAI системи рівнянь (6) є узагальнена алгебра Галілея з базисними генераторами

$$\mathrm{AG}_2(1,1) = \langle \partial_t,\ \partial_x,\ G = t\partial_x + Q_1,\ D = 2t\partial_x + x\partial_x + Q_2,\ \Pi = t^2\partial_t + tx\partial_x + xQ_1 + tQ_2 \rangle, \tag{7}$$

де $Q_1 = -\frac{1}{2}\partial_{u^1}$, $Q_2 = -(u^1\partial_{u^1} + u^2\partial_{u^2})$. Цей факт говорить про те, що система рівнянь Ван дер Ваальса, як і система рівнянь хемотаксису задовольняє принципу відносності Галілея.

У цій роботі поставимо задачу узагальнити систему рівнянь (3) при $m_1 = n_2 = 0$ на випадок субстрату–атрактанта та двох популяцій бактерій із збереженням інваріантності відносно узагальненої алгебри Галілея $\mathrm{AG}_2(1,1)$ та форми нелінійностей системи (3). Узагальнення даної системи рівнянь будемо шукати у вигляді

$$\begin{aligned} u^0_t &= \lambda_0 u^0_{xx} + u^0 f^0(u^1,u^2),\\ u^1_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^1}{u^0}u^0_x + \lambda_1 u^1_x + f^1(u^1,u^2)\right],\\ u^2_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^2}{u^0}u^0_x + \lambda_2 u^2_x + f^2(u^1,u^2)\right], \end{aligned} \tag{8}$$

де $u^0 = u^0(t,x)$ — концентрація субстрату–атрактанта, $u^1 = u^1(t,x)$ та $u^2 = u^2(t,x)$ — щільність бактерій першої та другої популяцій відповідно, λ_0 — коефіцієнт дифузії субстрату–атрактанта, λ_1, λ_2 — коефіцієнти дифузії першої та другої популяцій бактерій відповідно, $f^0 = f^0(u^1,u^2)$ — нелінійний коефіцієнт реактивної взаємодії популяцій бактерій та субстрату–атрактанта, $f^1 = f^1(u^1,u^2)$, $f^2 = f^2(u^1,u^2)$ — нелінійні коефіцієнти конвективної взаємодії цих об'єктів.

Спочатку будемо вимагати, щоб система рівнянь (8) була інваріантною відносно узагальненої алгебри Галілея (4), де

$$Q_1 = -\frac{1}{2\lambda_0}u^0\partial_{u^0}, \quad Q_2 = -\frac{1}{2}u^0\partial_{u^0} - u^1\partial_{u^1} - u^2\partial_{u^2}. \tag{9}$$

Справедливе твердження.

Теорема 1. *Для того, щоб система рівнянь (8) була інваріантною відносно узагальненої алгебри Галілея (4), (9), необхідно й достатньо, щоб вона мала вигляд*

$$\begin{aligned} u^0_t &= \lambda_0 u^0_{xx} + u^0(u^1)^2\varphi^0(\omega),\\ u^1_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^1}{u^0}u^0_x + \lambda_1 u^1_x + (u^1)^2\varphi^1(\omega)\right],\\ u^2_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^2}{u^0}u^0_x + \lambda_2 u^2_x + (u^1)^2\varphi^2(\omega)\right], \end{aligned} \tag{10}$$

де $\varphi^0 = \varphi^0(\omega)$, $\varphi^1 = \varphi^1(\omega)$, $\varphi^2 = \varphi^2(\omega)$ — довільні гладкі функції, $\omega = \frac{u^2}{u^1}$.

Якщо функції $\varphi^0 = \varphi^0(\omega)$, $\varphi^1 = \varphi^1(\omega)$, $\varphi^2 = \varphi^2(\omega)$ вибрати квадратичними за змінною ω

$$\varphi^0 = \alpha_0 + \beta_0\omega + \gamma_0\omega^2, \quad \varphi^1 = \alpha_1 + \beta_1\omega + \gamma_1\omega^2, \quad \varphi^2 = \alpha_2 + \beta_2\omega + \gamma_2\omega^2, \tag{11}$$

де α_0, β_0, γ_0, α_1, β_1, γ_1, α_2, β_2, γ_2, — довільні сталі, то отримаємо систему

$$\begin{aligned} u^0_t &= \lambda_0 u^0_{xx} + u^0\left[\alpha_0(u^1)^2 + \beta_0 u^1u^2 + \gamma_0(u^2)^2\right],\\ u^1_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^1}{u^0}u^0_x + \lambda_1 u^1_x + \alpha_1(u^1)^2 + \beta_1 u^1u^2 + \gamma_1(u^2)^2\right],\\ u^2_t &= \partial_x\left[2\lambda_0\frac{u^2}{u^0}u^0_x + \lambda_2 u^2_x + \alpha_2(u^1)^2 + \beta_2 u^1u^2 + \gamma_2(u^2)^2\right], \end{aligned} \tag{12}$$

яка узагальнює систему рівнянь (3) і за формою нелінійностей.

Застосувавши до системи (12) перетворення Коула–Хопфа

$$t = t, \quad x = x, \quad \frac{u^0_x}{u^0} = v^0, \quad u^a = v^a, \tag{13}$$

де $v^0 = v^0(t,x)$, $v^a = v^a(t,x)$ — нові невідомі функції, одержимо систему рівнянь

$$\begin{aligned} v^0_t &= \lambda_0 v^0_{xx} + \partial_x\big[\lambda_0 (v^0)^2 + \alpha_0 (v^1)^2 + \beta_0 v^1 v^2 + \gamma_0 (v^2)^2\big],\\ v^1_t &= \lambda_1 v^1_{xx} + \partial_x\big[2\lambda_0 v^0 v^1 + \alpha_1 (v^1)^2 + \beta_1 v^1 v^2 + \gamma_1 (v^2)^2\big],\\ v^2_t &= \lambda_2 v^2_{xx} + \partial_x\big[2\lambda_0 v^0 v^2 + \alpha_2 (v^1)^2 + \beta_2 v^1 v^2 + \gamma_2 (v^2)^2\big]. \end{aligned} \tag{14}$$

Систему рівнянь (14) можна пропонувати як узагальнення системи рівнянь Ван дер Ваальса (6) на випадок тривимірного векторного поля $V = \begin{pmatrix} v^0 \\ v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$.

Методом Лі можна довести наступне твердження.

Теорема 2. *Максимальною в розумінні С. Лі алгеброю інваріантності системи рівнянь* (14) *є узагальнена алгебра Галілея з базисними генераторами* (7), *де*

$$Q_1 = -\frac{1}{2\lambda_0}\partial_{u^0}, \quad Q_2 = -(u^0\partial_{u^0} + u^1\partial_{u^1} + u^2\partial_{u^2}). \tag{15}$$

Якщо популяції бактерій незалежні між собою, то система рівнянь (14) матиме вигляд

$$\begin{aligned} \tilde u^0_t &= \lambda_0 \tilde u^0_{xx} + \tilde u^0\big(\alpha_0 (\tilde u^1)^2 + \gamma_0 (\tilde u^2)^2\big),\\ \tilde u^1_t &= \lambda_1 \tilde u^1_{xx} + \partial_x\left(2\lambda_0 \tilde u^1 \frac{\tilde u^0_x}{\tilde u^0} + \alpha_1 (\tilde u^1)^2\right),\\ \tilde u^2_t &= \lambda_2 \tilde u^2_{xx} + \partial_x\left(2\lambda_0 \tilde u^2 \frac{\tilde u^0_x}{\tilde u^0} + \gamma_2 (\tilde u^2)^2\right). \end{aligned} \tag{16}$$

Зауважимо, що заміною (13) система (16) зводиться до системи рівнянь Ван дер Ваальса

$$\begin{aligned} u^0_t &= \lambda_0 u^0_{xx} + \partial_x\big[\lambda_0 (u^0)^2 + \alpha_0 (u^1)^2 + \gamma_0 (u^2)^2\big],\\ u^1_t &= \lambda_1 u^1_{xx} + \partial_x\big[2\lambda_0 u^0 u^1 + \alpha_1 (u^1)^2\big],\\ u^2_t &= \lambda_2 u^2_{xx} + \partial_x\big[2\lambda_0 u^0 u^2 + \gamma_2 (u^2)^2\big]. \end{aligned} \tag{17}$$

Дослідження Олександра А. Волошина підтримано грантом від Simons Foundation (SFI-PD-Ukraine-00014586, O.A.B.).

Література

[1] Сєров М.І., Подошвелев Ю.Г., Про нелокальні симетрії системи рівнянь хемотаксису з дерівативною нелінійністю, *Укр. матем. журн.* **74** (2022), no. 3, 373–388.