Liet. matem. rink., **44**, *spec. nr.*, 2004, 708–713

Fotosintezės modeliavimas

Marina GRABOVSKAJA, Donatas ŠVITRA (KU)
el. paštas: mat.kat@gmf.ku.lt

Fotosintezė – tai fermentinis procesas, kuris žaliuosiuose augaluose skirstomas į dvi fazes [1]:

1) šviesoje vykstančios reakcijos. Tai fotocheminė arba energinė fazė. Jos metu vyksta reakcijos, kurioms būtina šviesa;
2) tamsoje vykstančios reakcijos. Tai metabolinė arba termocheminė fazė. Jos metu vyksta reakcijos, kurioms šviesa nėra būtina.

Šviesoje vykstančių reakcijų modeliavimui skirta nemažai darbų [2–3]. Mes nagrinėsime tamsoje vykstančias reakcijas.

Nagrinėjama diferencialinių lygčių sistema:

$$\dot{C}_3 = \alpha_1 C_3^2 - \alpha_2 C_3 C_6 + \alpha_3, \tag{1}$$

$$\dot{C}_6 = \beta_1 C_3^2 - \beta_2 C_6^2 - \beta_3 C_3 C_6, \tag{2}$$

kur C_3 yra triozofosfato, o C_6 – heksozofosfato koncentracijos, o parametrai α_i, β_i (i=1, 2, 3) tenkina sąlygas:

$$\alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 = 0;\ \beta_2 = \frac{1}{7}\beta_1;\ \beta_3 = \frac{6}{7}\beta_1;\ \beta_1 - \beta_2 - \beta_3 = 0;\ \alpha_3 < \frac{1}{7}\alpha_1. \tag{3}$$

Lygtys (1)–(2) fotosintezės cheminių reakcijų Kalvino cikle aprašyti buvo pasiūlytos darbe [5].

1. Tiesinė analizė.

Abi lygtis daliname iš α_1 ir pasinaudojus (3) įvesime parametrus $\gamma = \frac{\alpha_3}{\alpha_1}$, $\eta = \frac{\beta_1}{\alpha_1}$. Dabar sistema (1)–(2) atrodo taip:

$$\dot{C}_3 = C_3^2 - (1+\gamma)\, C_3 C_6 + \gamma, \tag{4}$$

$$\dot{C}_6 = \eta C_3^2 - \frac{1}{7}\eta C_6^2 - \frac{6}{7}\eta C_3 C_6. \tag{5}$$

Sistema (4)–(5) turi teigiamą pusiausvyros būseną A(1; 1). Jos aplinkoje ir nagrinėsime sistemos (4)–(5) dinamiką.

Pakeitimais $x = C_3 + 1$, $y = C_6 + 1$ koordinačių pradžią perkelkime į pusiausvyros būseną A(1; 1). Gausime sistemą:

$$\dot{x} = x - \alpha y + \beta x^2 - \alpha x y, \tag{6}$$

$$\dot{y} = cx - cy + \frac{7}{8}cx^2 - \frac{3}{4}cxy - \frac{1}{8}cy^2. \tag{7}$$

Kur $\alpha = \frac{1+\gamma}{1-\gamma}$, $\beta = \frac{1}{1-\gamma}$, $c = \frac{8\eta}{7(1-\gamma)}$. Sistemos (6)–(7) tiesinė dalis yra:

$$\dot{x} = x - \alpha y, \tag{8}$$

$$\dot{y} = cx - cy. \tag{9}$$

Šios sistemos charakteringoji lygtis

$$\lambda^2 - (1 - c)\lambda + c(\alpha - 1) = 0 \tag{10}$$

turi šaknis

$$\lambda_{1,2} = \frac{1 - c \pm i\sqrt{4c(\alpha - 1) - (1 - c)^2}}{2}. \tag{11}$$

Į charakteringą lygtį (10) įvedame mažą parametrą $\varepsilon = 1 - c$. Dabar (10) lygties šaknys:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\varepsilon \pm i\sqrt{c(\alpha - 1) - \frac{\varepsilon^2}{4}}. \tag{12}$$

Diferencialinių lygčių sistema turės periodinį sprendinį tik tada, kai charakteringoji lygtis turės porą kompleksinių sujungtinių šaknų, todėl reikalaujame, kad būtų patenkintos sąlygos:

$$c(\alpha - 1) - \frac{\varepsilon^2}{4} > 0, \quad c(\alpha - 1) > 0.$$

Prie šių sąlygų (10) lygtis turi porą kompleksinių sujungtinių šaknų: $\lambda(\varepsilon) = \tau(\varepsilon) + i\sigma(\varepsilon)$, $\bar{\lambda}(\varepsilon) = \tau(\varepsilon) - i\sigma(\varepsilon)$, čia $\tau(\varepsilon) = \frac{1}{2}\varepsilon$ ir $\sigma(\varepsilon) = \sqrt{c(\alpha - 1) - \frac{1}{4}\varepsilon^2}$ yra parametro ε funkcijos ir tenkina sąlygas:

$$\tau(0) = 0, \quad \tau'_0 = \frac{d}{d\varepsilon}\tau(\varepsilon)\bigg|_{\varepsilon=0} = \frac{1}{2} > 0, \quad \sigma_0 = \sigma(0) = \sqrt{\alpha - 1} > 0. \tag{13}$$

Sistemą (8)–(9) užrašome matriciniu pavidalu:

$$\dot{z} = A(\varepsilon)z, \quad \text{kur } A(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha \\ 1 - \varepsilon & -1 + \varepsilon \end{pmatrix}, \ z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Rasime matricos $A_0 = A(0)$ ir jai sujungtinės matricos A_0^*(mūsų atvejuA_0^T) tikrinius vektorius e_0 ir h_0 atitinkamai ir kurie tenkina lygybes: $A_0(i\sigma_0)e_0 = i\sigma_0 e_0$, $A_0^*(-i\sigma_0)h_0 = -i\sigma_0 h_0$. Nesunku parodyti, kad

$$e_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad h_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_0} \\ -\frac{1}{\sigma_0} \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Tarkime, $E_1(t)$ ir $E_2(t)$ yra tiesinių diferencialinių lygčių sistemos

$$\dot{z}(t) = A_0 z$$

tiesiškai nepriklausomi $\frac{2\pi}{\sigma_0}$ – periodiniai sprendiniai, o funkcijos $H_1(t)$ ir $H_2(t)$ yra prijungtinės tiesinių diferencialinių lygčių sistemos

$$\dot{z}(t) = -A_0^* z$$

$\frac{2\pi}{\sigma_0}$ – periodiniai sprendiniai.

Iš ortogonalumo sąlygos:

$$(h_k, e_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 0, & i = j \\ 1, & i \neq j \end{cases}, \qquad (k, j = 1, 2)$$

gauname, kad

$$E_1(t) = \begin{pmatrix} cos\sigma_0 t - \sigma_0 sin\sigma_0 t \\ cos\sigma_0 t \end{pmatrix}, \quad E_2(t) = \begin{pmatrix} sin\sigma_0 t + \sigma_0 cos\sigma_0 t \\ sin\sigma_0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$H_1(t) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_0} sin\sigma_0 t \\ cos\sigma_0 t + \frac{1}{\sigma_0} sin\sigma_0 t \end{pmatrix}, \quad H_2(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_0} cos\sigma_0 t \\ sin\sigma_0 t - \frac{1}{\sigma_0} cos\sigma_0 t \end{pmatrix} \tag{16}$$

2. Netiesinė analizė

Toliau nagrinėsime sistemą (6)–(7). Įvedus į ją parametrą $\varepsilon = 1 - c$ gausime sistemą:

$$\dot{x} = x - \alpha y + \beta x^2 - \alpha x y, \tag{17}$$

$$\dot{y} = (1-\varepsilon)x - (1-\varepsilon)y + \frac{7}{8}(1-\varepsilon)x^2 - \frac{3}{4}(1-\varepsilon)xy - \frac{1}{8}(1-\varepsilon)y^2. \tag{18}$$

Matricinis šios sistemos pavidalas

$$\dot{z} = A(\varepsilon) z + \Phi(z; \varepsilon), \tag{19}$$

kur vektorius $\Phi(z;\varepsilon)$ sudaro sistemos (17)–(18) netiesinę dalį. Kai $\varepsilon = 0$, turime:

$$\dot{x} = x - \alpha y + \beta x^2 - \alpha x y, \tag{20}$$

$$\dot{y} = x - y + \frac{7}{8}x^2 - \frac{3}{4}xy - \frac{1}{8}y^2. \tag{21}$$

Matricinis šios sistemos pavidalas:

$$\dot{z} = A_0 z + \Phi_0(z), \tag{22}$$

kur vektorius $\Phi_0(z) = \Phi(z; 0)$.

Toliau pasiremsime bifurkacijų teorija, išvystyta įvairioms diferencialinių lygčių klasėms monografijose [4], [6].

Matricineje lygtyje (22) normuojame laiką, t.y. atliekame keitimą

$$t = \left(1 + c_0\xi^2\right)\tau.$$

Gauname lygtį:

$$\dot{z} = \left(1 + c_0\xi^2\right)\left[A_0 z + \Phi(z)\right] \tag{23}$$

Į (23) toliau įstatome išraišką

$$z(\tau,\xi) = \xi E_1(\tau) + \xi^2 z_2(\tau) + \xi^3\left[z_3(\tau) + d_0\tau E_1(\tau)\right], \tag{24}$$

kur c_0 ir d_0 – tam tikri pastovūs dydžiai, o

$$z_k(\tau) = \begin{pmatrix} x_k(\tau) \\ y_k(\tau) \end{pmatrix}, \quad (k = 2, 3).$$

Surenkame lygtyje (23) koeficientus prie ξ^2. Gauname diferencialinių lygčių sistemą:

$$x'_2(\tau) = x_2(\tau) - \alpha y_2(\tau) + f_2(\tau), \tag{25}$$

$$y'_2(\tau) = x_2(\tau) - y_2(\tau) + g_2(\tau), \tag{26}$$

kur

$$f_2(\tau) = \beta\left(cos\sigma_0\tau - \sigma_0 sin\sigma_0\tau\right)^2 - \alpha cos\sigma_0\tau\left(cos\sigma_0\tau - \sigma_0 sin\sigma_0\tau\right),$$

$$g_2(\tau) = \frac{7}{8}\left(cos\sigma_0\tau - \sigma_0 sin\sigma_0\tau\right)^2 - \frac{3}{4}cos\sigma_0\tau\left(cos\sigma_0\tau - \sigma_0 sin\sigma_0\tau\right) - \frac{1}{8}cos^2\sigma_0\tau.$$

Šios sistemos sprendinio ieškome pavidale

$$x_2(\tau) = A_0^{(2)} + A_{2s}^{(2)} sin2\sigma_0\tau + A_{2c}^{(2)} cos2\sigma_0\tau, \tag{27}$$

$$y_2(\tau) = B_0^{(2)} + B_{2s}^{(2)} sin2\sigma_0\tau + B_{2c}^{(2)} cos2\sigma_0\tau. \tag{28}$$

Įstatę išraiškas (27)–(28) į sistemą (25)–(26) ir prilyginę koeficientus prie vienodų harmonikų, gaunam šešių tiesinių lygčių sistemą koeficientams $A_0^{(2)}$, $A_{2s}^{(2)}$, $A_{2c}^{(2)}$, $B_0^{(2)}$, $B_{2s}^{(2)}$, $B_{2c}^{(2)}$ nustatyti. Nesunkiai gauname,kad

$$A_0^{(2)} = \frac{1}{2}\left(\frac{\beta - \alpha}{\sigma_0^2} - \frac{7\left(\sigma_0^2 + 1\right)}{8} + \beta\right),$$

$$A_{2s}^{(2)} = \frac{1}{6}\left(\frac{\alpha}{\sigma_0} - 4\sigma_0\beta + \alpha\sigma_0\right) + \frac{1}{3\sigma_0}\left(\frac{\alpha^2}{2} - \alpha\beta + \beta\right),$$

$$A_{2c}^{(2)} = \frac{1}{6}\left[\alpha\left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{9}{8}\right) + \beta\left(5 - \frac{1}{\sigma_0^2}\right)\right], \quad B_0^{(2)} = \frac{1}{2}\left(\frac{\beta - \alpha}{\sigma_0^2} - \frac{7}{8} + \beta\right),$$

$$B_{2s}^{(2)} = \frac{1}{6}\left(\frac{2\beta-\alpha-1}{\sigma_0} - \frac{7\sigma_0}{4}\right), \quad B_{2c}^{(2)} = \frac{1}{6}\left(\frac{\alpha-\beta}{\sigma_0^2} + \beta + \frac{9}{8}\right).$$

Toliau lygtyje (23) surenkame koeficientus prie ξ^3. Gauname diferencialinių lygčių sistemą:

$$x'_3(\tau) = x_3(\tau) - \alpha y_3(\tau) + f_3(\tau), \tag{29}$$

$$y'_3(\tau) = x_3(\tau) - y_3(\tau) + g_3(\tau), \tag{30}$$

kur

$$f_3(\tau) = x_2(\tau)\left[(2\beta-\alpha)cos\sigma_0\tau - 2\beta\sigma_0 sin\sigma_0\tau\right] + \alpha y_2(\tau)(\sigma_0 sin\sigma_0\tau - cos\sigma_0\tau)$$
$$- c_0\sigma_0[\sigma_0 cos\sigma_0\tau + sin\sigma_0\tau] + d_0[\sigma_0 sin\sigma_0\tau - cos\sigma_0\tau]$$

$$g_3(\tau) = \frac{7}{4}x_2(\tau)\left(cos\sigma_0\tau - \frac{7}{4}\sigma_0 sin\sigma_0\tau\right) + y_2(\tau)\left(\frac{3}{4}\sigma_0 sin\sigma_0\tau - cos\sigma_0\tau\right)$$
$$- c_0\sigma_0 sin\sigma_0\tau - d_0 cos\sigma_0\tau.$$

Kad sistema (29) – (30) turėtų $\frac{2\pi}{\sigma_0}$ periodinį sprendinį, būtina ir pakankama, kad būtų patenkintos lygybės:

$$\frac{2\pi}{\sigma_0}\int_0^{2\pi/\sigma_0}(F_2(\tau), H_1(\tau))\,d\tau = 0, \tag{31}$$

$$\frac{2\pi}{\sigma_0}\int_0^{2\pi/\sigma_0}(F_2(\tau), H_2(\tau))\,d\tau = 0, \tag{32}$$

kur $F_2 \in R^2$ – sistemos (29)–(30) nehomogeninė dalis. Iš sąlygų (31)–(32) vienareikšmiškai nustatome dydžius c_0 ir d_0:

$$d_0 = \frac{1}{2}(k_2 - k_6 - k_7) + \frac{1}{4}\left(\frac{k_4 - k_8}{\sigma_0} + \frac{3}{2}k_{10} - 3k_5 - k_9\right), \tag{33}$$

$$c_0 = \frac{1}{4\sigma_0^2}(-2k_1 - k_3 - \sigma_0 k_8 + 2k_6 + k_9) - \frac{1}{2}\left(k_7 + \frac{3}{4}k_{10}\right). \tag{34}$$

Čia

$$k_1 = (2\beta-\alpha)\left(A_0^{(2)} + A_{2c}^{(2)}\right), \quad k_2 = \alpha\left(B_0^{(2)} + B_{2c}^{(2)}\right) - 2\beta\left(A_0^{(2)} + A_{2c}^{(2)}\right),$$

$$k_3 = \alpha\sigma_0 B_{2s}^{(2)} - 2\beta\sigma_0 A_{2s}^{(2)} - (2\beta-\alpha)A_{2c}^{(2)}, \quad k_4 = (2\beta-\alpha)A_{2s}^{(2)},$$

$$k_5 = \alpha B_{2c}^{(2)} - 2\beta A_{2c}^{(2)}, \quad k_6 = A_0^{(2)} - B_0^{(2)} + A_{2c}^{(2)} - B_{2c}^{(2)},$$

$$k_7 = \frac{1}{4}\left(3B_0^{(2)} - 7A_0^{(2)} + 3B_{2c}^{(2)} - 7A_{2c}^{(2)}\right), \quad k_8 = A_{2s}^{(2)} - B_{2s}^{(2)},$$

$$k_9 = \frac{\sigma_0}{4}\left(3B_{2s}^{(2)} - 7A_{2s}^{(2)}\right) - A_{2c}^{(2)} + B_{2c}^{(2)}, \quad k_{10} = \frac{1}{2}\left(3B_{2c}^{(2)} - 7A_{2c}^{(2)}\right).$$

Teorema [4]. *Prie* $|\varepsilon| \leqslant \varepsilon_0$ *galioja tokie teiginiai:*

1. *Jei* $\varepsilon \tau'_0 d_0 < 0$, *tai lygtis* (19) *turi vienintelį periodinį sprendinį*

$$z(t,\varepsilon) = \sqrt{\frac{-\tau_0'\varepsilon}{d_0}} E_1(\tau) - \frac{\tau_0'\varepsilon}{d_0} z_2(\tau) + o(\varepsilon), \tag{35}$$

kur

$$t = \left[1 - \left(\frac{\tau_0' c_0}{d_0} + \frac{\sigma_0'}{\sigma_0}\right)\varepsilon\right]\tau, \tag{36}$$

2. *Šis sprendinys stabilus, jei* $d_0 < 0$, *ir nestabilus, jei* $d_0 > 0$.

Mūsų atveju periodinis sprendinys turi pavidalą:

$$x(t,\varepsilon) = \sqrt{\frac{-\tau_0'\varepsilon}{d_0}} (cos\sigma_0\tau - \sigma_0 sin\sigma_0\tau)$$
$$- \frac{\tau_0'\varepsilon}{d_0}\left(A_0^{(2)} + A_{2s}^{(2)} sin2\sigma_0\tau + A_{2c}^{(2)} cos2\sigma_0\tau\right) + o(\varepsilon), \tag{37}$$

$$y(t,\varepsilon) = \sqrt{\frac{-\tau_0'\varepsilon}{d_0}} cos\sigma_0\tau - \frac{\tau_0'\varepsilon}{d_0}\left(B_0^{(2)} + B_{2s}^{(2)} sin2\sigma_0\tau + B_{2c}^{(2)} cos2\sigma_0\tau\right) + o(\varepsilon). \tag{38}$$

Skaitinė analizė, atlikta prie $\gamma = 0,1$ ir $\eta = 0,75$ parodė, kad gauti teorinių sprendinių grafikai gerai sutampa su Rungės–Kuta metodo pagalba gautais sprendiniais.

Literatūra

1. A. Praškevičius, L. Ivanovienė, H. Rodovičius, *Biologinės membranos, biologinė oksidacija, fotosintezė*, KMU leidykla, Kaunas (2001).
2. А.Б. Рубин, Н.Ф. Пытьева, Г.Ю. Ризниченко, *Кинетика биологических процессов*, Издательство МГУ, 170–219 (1987).
3. А.Б. Рубин, Т.Е. Кренделева, *Регуляция первичных процессов фотосинтеза*, МГУ, Москва, (2003).
4. Д.И. Швитра, *Динамика физиологических систем*, Мокслас, Вильнюс (1989).
5. Н.М. Чернавская, Д.С. Чернавский, Об автоколебаниях в процессе фотосинтеза, *Биофизика*, **3**(4), 521–523 (1958).
6. Ю.С. Колесов, Д.И. Швитра, *Автоколебания в системах с запаздыванием*, Мокслас, Вильнюс (1979).

SUMMARY

M. Grabovskaja, D. Švitra. Simulation of a photosynthesis

It is observed the differential equations system. The stable periodic solutions of the differential equations system of neutral type is constructed, which is based on the theory of bifurcations.

Keywords: photosynthesis, differential equations, periodic solution.