

УДК 582.288: 536.42 + 582.288: 536.76

© А. Л. Буляница

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОЛОНИЯХ НЕСОВЕРШЕННЫХ МИЦЕЛИАЛЬНЫХ ГРИБОВ

Процесс самоорганизации колонии несовершенных грибов может осуществляться в соответствии с тремя основными стратегиями — "сплошной газон", "кольцевые структуры" и "умирание колонии" [1]. Взаимосвязь между указанными стратегиями и сами стратегии могут быть описаны с позиций теории фазовых превращений, которая развита главным образом применительно к термодинамике [2]. Анализируемые фазовые превращения стратегий "умирания" и "сплошного газона" в "кольцевые структуры" имеют признаки фазовых переходов первого и второго рода. Вместе с тем интерпретация собственно стратегии "кольцевых структур" при этих превращениях неоднозначна.

ВВЕДЕНИЕ

Фазовые превращения — переходы вещества из одной фазы в другую, при которых условия фазового равновесия не нарушаются. Как известно, различают два типа фазовых превращений (фазовых переходов). Примеры фазовых переходов как первого, так и второго рода достаточно многочисленны. В частности, наиболее известные фазовые переходы первого рода: переход газа в жидкость и в твердое состояние, жидкости в твердое тело, одной кристаллической модификации в другую. Примерами фазовых переходов второго рода могут служить: переход сверхпроводника в сверхпроводящее состояние при отсутствии магнитного поля; ферромагнетика в парамагнетик; некоторых сегнетоэлектриков из полярной в неполярную модификацию; переходы в бинарных сплавах, связанные с изменением упорядоченности кристалла, и т. д.

Если базироваться на развитой Ландау термодинамической теории фазовых переходов [2], то для применения теории фазовых переходов к явлениям, отличным от термодинамических, необходимо ввести параметр порядка η , адекватный аналог термодинамической температуры и выявить связь $\eta = f(T, T_c)$, где T_c — критическое значение температуры.

Как отмечено в более поздних работах, например [3], искомая связь при фазовом переходе второго рода имеет вид:

$$\eta = 0 \quad \text{при } T > T_c,$$

$$\eta = |T - T_c|^\beta, \quad \text{если } T < T_c.$$

Следовательно, после обоснования наличия в системе двух или трех фаз, различающихся симметрией, требуется ввести параметр порядка, най-

ти аналог термодинамической температуры и определить два параметра зависимости $\eta = f(T, T_c)$, а именно критическую температуру T_c и показатель степени β . Если $\beta > 0$, то должен наблюдаться фазовый переход второго рода. Признаком фазового перехода первого рода в этом случае будет скачок параметра порядка η , чему будут соответствовать неположительные значения β .

В работе [4] исследован диморфный переход (переход от мицелиальной к дрожжевой форме роста) в контексте теории фазовых переходов. Также была выявлена аналогия между процессами кооперативного развития клеток при морфогенезе и фазовыми переходами в физических системах [5, 6]. Основаниями для использования теории фазовых переходов послужили три базовых положения:

1) способность грибной клетки развиваться по двум альтернативным путям развития, что позволяет интерпретировать ее как бистабильный элемент;

2) естественность выбора в качестве параметра порядка относительной доли M мицелиальных клеток (меняющейся от 0 до 1);

3) использование в качестве термодинамических аналогов температуры (и соответствующих критических ее значений) концентраций ионов металлов (Zn, Mg, Fe).

Были отмечены и исследованы ряд особенностей указанного фазового перехода [4]:

а) процесс адекватно описывается по аналогии с теорией Ландау фазовых переходов второго рода;

б) проявляется свойство "размытости" за счет влияния флуктуаций;

в) отмечено существование гистерезиса (необратимости обратного клеточного перехода "дрожжи—мицелий"), что более характерно для фазовых переходов первого рода.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ "СПЛОШНОЙ ГАЗОН" ↔ "КОЛЬЦЕВЫЕ СТРУКТУРЫ"

В настоящей работе рассмотрим другие процессы, связанные с самоорганизацией колонии несовершенных грибов. Закрепление всего комплекса условий (параметров математической модели), за исключением одного, можно считать аналогичным фиксации давления в термодинамике. В свою очередь варьирование одной незафиксированной величины можно толковать как изменение температуры.

Исследуем превращение колонии "сплошной газон" ↔ "кольцевые (зональные) структуры". Первую структуру можно трактовать как первую (равномерную) фазу, любую выраженную кольцевую структуру — как вторую (неравномерную) фазу. Тогда, выбрав в качестве параметра порядка η величину, характеризующую неравномерность колонии, добиваемся того, что для первой фазы $\eta = 0$. В качестве параметра порядка можно выбрать информацию Фишера, определяемую как разность между максимальным значением энтропии колонии (S_{\max}) и текущим значением (S). Описание и расчет величины S приведены в [7].

Таким образом, $\eta = S_{\max} - S$. Закрепив параметры модели [1], оставим один варьируемый параметр, играющий роль термодинамической температуры. При этом закрепленные параметры должны иметь такие значения, чтобы варьированием можно было реализовать по крайней мере обе указанные стратегии развития колонии — сплошной газон и кольцевые структуры. То есть заранее ограничиваем выбор условий (в термодинамике — задаем соответствующее давление), при которых изменение температуры позволило бы осуществить переход из одной фазы в другую.

Следует ответить на главный вопрос: имеется ли какой-либо параметр модели, который может играть роль температуры? Если на этот вопрос будет дан утвердительный ответ, требуется вывести зависимость параметра порядка от температуры, определить критическое ее значение и величину параметра β , а также оценить чувствительность характеристик фазового перехода (T_c , β) к изменению остальных условий.

В качестве аналога температуры выбран параметр модели λ , характеризующий скорость воспроизводства мицелиальных клеток. Все остальные параметры, подробно описанные и охарактеризованные в базовой работе [1], принимают значения: $\rho_0 = 0.05$; $\xi_0 = 0.05$; $\eta = 0.9$; $\varepsilon = 0.3$; $\alpha = 1$; $\gamma = 0.5$; $\mu_0 = 4$; $\tau_0 = 0.5$; $\nu = 1$; $s_0 = 20$; $D_s = 10^{-5}$; $D_m = 0.001$. В этих условиях субстрат является практически неисчерпаемым и недиффундирующим. При расчете параметра порядка не учитыва-

ется область колонии относительного радиуса 0.03, непосредственно примыкающая к внешнему краю чашки Петри. Тем самым исключаются возможные неравномерности, связанные с краевыми эффектами. Максимальное значение энтропии будет $S_{\max} = \log_2(291) = 8.18487$. Переход к двойным логарифмическим координатам позволяет преобразовать зависимость $\eta = |T - T_c|^\beta$ к прямой с параметром положения β . Критическое значение $\lambda_c = T_c$ и величина β определяются по критерию максимума коэффициента корреляции между зависимостью $\log(\eta) = f(\log(\lambda_c - \lambda))$ и ее линейной аппроксимацией.

На рис. 1 представлена соответствующая зависимость, на основании которой определены параметры $\lambda_c = 4.03$ и $\beta = 0.454$.

Влияние остальных условий (параметров модели) на характеристики фазового перехода иллюстрируется данными таблицы. Для термодинамической системы это соответствует изменению давления.

Все рассмотренные зависимости параметра порядка от температуры допускают обоснованную степенную аппроксимацию, поскольку величины выборочного коэффициента корреляции r близки к 1. Таким образом, есть достаточные основания для принятия аналогии перехода стратегии развития колонии от кольцевой к сплошному газону с фазовым переходом второго рода. Характеристика перехода (параметр β) слабо зависит от варьируемых ресурсной плотности мицелия (ε) и ограничительного предела по отравлению мицелия продуктами метаболизма (μ_0). При этом критические значения температуры (параметра λ) меняются: по мере убывания μ_0 критическое значение λ_c растет (т. к. требуется более быстрое развитие мицелия, чтобы раньше "успеть" развиваться

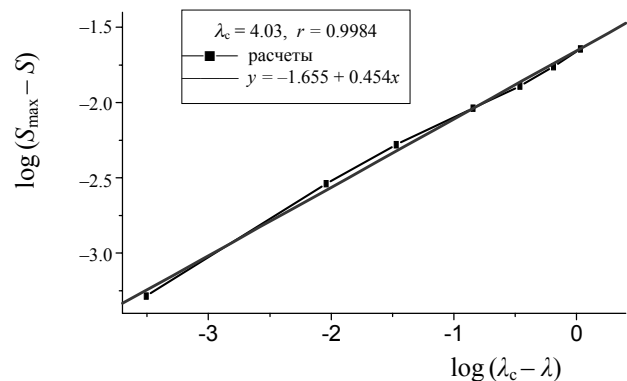


Рис. 1. Линейная аппроксимация для поиска параметров фазового перехода

Параметры фазовых переходов при различных условиях самоорганизации колонии

Условия самоорганизации колонии			λ_c	β	r
ε	$D_m \cdot 10^3$	μ_0			
0.3	1.5	6	3.38	2.39	0.9972
0.3	1	4	4.03	0.454	0.9984
0.25	1	4	5.38	0.567	0.9946
0.25	1	3	6.40	0.558	0.9924

до уровня "сплошного газона"). При увеличении ресурсной плотности (уменьшении ε) λ_c растет по тем же причинам (требуется "дорастать" до большей плотности!).

В отличие от двух предыдущих величин изменение коэффициента диффузии продуктов метаболизма значимо повлияло на параметр β , не изменив типа фазового перехода, но косвенно подтвердив описанную в работе [1] ведущую роль метаболитов в выборе стратегии развития колонии.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ "УМИРАНИЕ КОЛОНИИ" ↔ "КОЛЬЦЕВЫЕ СТРУКТУРЫ"

Наличие другой пары стратегий самоорганизации колонии — "умирание колонии" и "кольцевые (зональные) структуры" (КС) — также позволяет предложить их интерпретацию как двухфазную систему с наиболее упорядоченной (кусочно-равномерной) и неравномерной фазами. По-видимому, и в этом случае параметр порядка следует связывать с энтропией (или информацией Фишера) и использовать как температуру параметр λ . Зависимость параметра порядка (энтропии S) от λ представлены на рис. 2.

Зависимость на рис. 2 имеет участки с очень большой производной: первый — в области $\lambda = 0.7$, второй, не столь ярко выраженный, — в области $\lambda = 0.85$. Поскольку зависимость $S(\lambda)$ имеет такие участки, они могут интерпретироваться как скачки S . Такая динамика более соответствует случаю фазового перехода первого рода. При этом областей, подозрительных на наличие такого перехода, выявлено две.

Для возможного объяснения рассмотрим структуры колоний, реализующихся при переходе λ

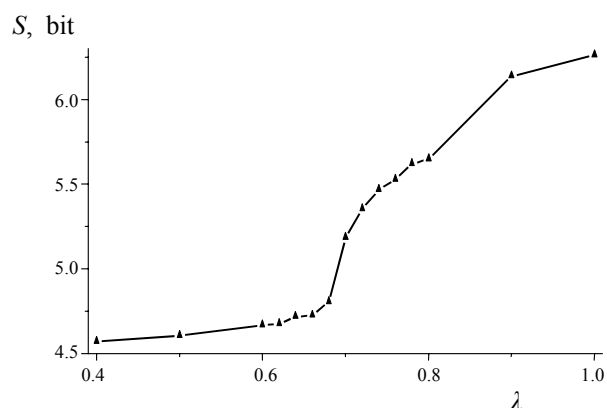


Рис. 2. Зависимость энтропии S от параметра λ в случае фазового превращения стратегий "умирания" в КС ($D_m = 0.002$)

через характерные значения 0.7 и 0.85. Соответствующие структуры представлены на рис. 3.

Наличие двух возможных фазовых переходов, обладающих признаками фазовых переходов первого рода, требует уточнения трактовки альтернативных стратегий развития — "умирание колонии" и КС — как наличия двух фаз или трактовки колонии как бистабильного элемента. По-видимому, в этом контексте КС не может рассматриваться в рамках одной фазы. На рис. 3 представлены фрагменты структур трех мицелиальных колоний, соответствующих значениям параметра λ до первой, после первой и после второй точек фазовых переходов.

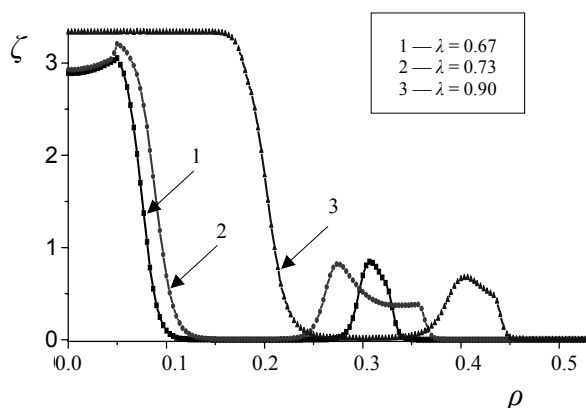


Рис. 3. Фрагменты структур 3 мицелиальных колоний грибов (3 разных значения параметра λ). По осям отложены: ζ — плотность мицелия, ρ — относительная радиальная координата

Если исключить из понятия первого кольца развитый только в области начального посева мицелий, то первая структура колонии может соответствовать схеме "0+1": 0 внутренних колец (только область посева) + 1 внешнее. Развитие колонии в области посева можно не считать образованием кольца, поскольку осуществление самого посева без дальнейшего развития мицелиальной формы уже обеспечивает наличие мицелиальных клеток, локализованных в зоне посева. С этих позиций вторая структура соответствует схеме "0+1.5" (или "0+2", если считать второе внешнее кольцо проявившимся). Третьей колонии может соответствовать схема "1+1", т. к. радиус внутреннего кольца существенно превосходит величину ρ_0 . Считая, что в рамках кольцевой фазы можно выделить более подробно состояния, соответствующие приведенным схемам, получается, что собственно кольцевая (зональная) структура представляет собой метастабильное состояние. Тип перехода между этими состояниями обладает признаками фазового перехода первого рода, поскольку параметр порядка (энтропия) практически имеет скачки (точнее, участки с очень большой производной).

Разумеется, данная трактовка нуждается в дальнейшем развитии. В частности, в настоящий момент остаются невыясненными следующие вопросы:

а) дуализм зональной (кольцевой) структуры в рамках превращений "сплошной газон" \leftrightarrow КС, где последняя трактуется второй (неравномерной) фазой, а колония — бистабильным элементом, и в

рамках превращений "умирание" \leftrightarrow КС, где последняя может трактоваться как метастабильное состояние.

б) является ли последовательность смены состояний в рамках КС одной и той же или существует несколько детерминированных последовательностей с запретами на переходы из некоторых состояний к другим (например, невозможность перехода от схемы "1+1" к схеме "0+2(3, 4,...)"). В этом случае такие последовательности будут напоминать последовательность заполнения электронных оболочек атомов. Более точная трактовка выбора стратегии развития самоорганизующейся колонии несовершенных грибов с позиций фазовых превращений является предметом дальнейших исследований.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- Переход стратегии самоорганизации колонии несовершенных грибов от "сплошного газона" к КС может трактоваться с позиций фазового перехода второго рода. При этом параметром порядка можно считать информационное количество (информацию) Фишера, роль термодинамической температуры играет параметр λ . Критическое значение параметра достаточно слабо зависит от таких характеристик роста, как μ_0 и ε , и существенно меняется в зависимости от изменения D_m . При этом (при сохранении типа фазового перехода: фазовый переход второго рода с относительно малым размытием) может изменяться параметр β .

- Переход от стратегии "умирания" к КС, по-видимому, не может быть описан в рамках двухфазной системы. При этом трактовка КС как метастабильного состояния (соответствующего различным схемам расположения колец) позволяет описать последовательность переходов от одного состояния к другому с позиций фазовых переходов первого рода. Параметром порядка в этом случае является энтропия, а переход от одного состояния к другому в рамках КС характеризуется большими значениями производной $dS/d\lambda$.

- Роль аналога термодинамической температуры могут играть те параметры, монотонное изменение которых приведет к монотонному изменению S . Такowymi свойствами обладают, например, α и μ_0 и заведомо не обладает D_m [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буляница А.Л. и др. Модель образования пространственно-временных периодических структур в колониях мицелиальных грибов // Журнал общей биологии. 2000. Т. 61, № 4. С. 400–411.

2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. Серия "Теоретическая физика". Т. 5. М.: Наука, 1976. 584 с.
3. Берже П. Конвекция Рэлея—Бенара в жидкостях с высоким числом Прандтля // Сб. статей "Синергетика" / Пер. с англ. под ред. Кадомцева Б.Б. М.: Мир, 1984. 248 с.
4. Кумзеров Ю.А., Панина Л.К. Фазовый переход в диморфных грибах // Биофизика. 2000. Т. 45, вып. 6. С. 1119–1124.
5. Белинцев Б.Н., Волькенштейн М.В. // ДАН СССР. 1977. Т. 235, № 1. С. 205–207.
6. Волькенштейн М.В. Физика и биология. М.: Наука, 1980. 152 с.
7. Буляница А.Л., Курочкин В.Е. Исследование процессов упорядочивания в открытых системах (на примере эволюции колонии несовершенных мицелиальных грибов) // Научное приборостроение. 2000. Т. 10, № 2. С. 43–49.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*

Материал поступил в редакцию 4.03.2004.

PHASE TRANSITIONS IN IMPERFECT MYCELIUM FUNGUS COLONIES

A. L. Bulyanitsa

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The process of imperfect fungal colony self-organization may follow three main strategies: "continuous lawn", "ring structures" and "colony dying" [1]. The relationships between these strategies and the strategies themselves can be described in terms of phase transformation theory which was developed primarily for thermodynamic problems [2]. The analyzed phase transformations of the "dying" and "continuous lawn" strategies have the features of phase transitions of the first and second kind. Nevertheless interpretation of the "ring structure" strategy proper with these transformations is ambiguous.