ВЕДУЩИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ ПРОДУКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

(теоретический анализ кривых роста)

А. М. Молчанов

Живое плохо поддается математическому анализу. Поэтому из-за известной принципиальной нелинейности биосистем, а также из-за многопараметричности и многомерности почти всех сложных систем первых исследователей — математиков моделеров охватило уныние. Разочарование чисто компьютерной методикой лаконично выражено фразой «The end of computing is in sight not numbers»[1], которая в настоящее время звучит значительно более обнадеживающе: «The ned of computing is INSIGHT, not numbers[2].

Автор настоящей статьи придерживается оптимистического взгляда на роль математики в биологии, полагая, что еще далеко не исчерпаны возможности чисто теоретического анализа, даже без применения на первых порах вычислительной техники.

В этой статье предпринята попытка сделать некоторые выводы из одного только предположения, что изучаемый биологический процесс может быть описан в принципе кинетической математической моделью.

Схема трех масштабов времени. Существенные переменные. В любой живой системе одновременно протекают процессы с весьма различными по величине скоростями. Исследователь, выделяя интересующий его процесс, должен составить себе четкое представление об основном масштабе времени, характеризующем данный процесс. Все остальные будут по отношению к заданному либо быстрыми, либо медленными. Это важное, хотя и несложное соображение допускает простую формализацию введением малого параметра:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \varepsilon F(\alpha, x, y), \quad \frac{dx}{dt} = G(\alpha, x, y),$$

$$\varepsilon \frac{dy}{dt} = H(\alpha, x, y), \qquad (1)$$

где α — медленные переменные («параметры»), x — изучаемые основные переменные и y — быстрые переменные.

Так, например, при изучении у растений физиологических процессов (x) метаболические переменные (y) будут быстрыми, а структурные характеристики (α), такие, как длина стеб-

[1] Конец приходит вычислениям, а числам нет конца.

[2] Озарение, а не числа — цель вычислений.

Принципы управления продукционными процессами в агроэкосистемах.
М.: Наука, 1976.

ля, площадь листьев, масса зерен, играют роль медленных переменных параметров системы.

Но если ставится задача изучения роста зерна, то физиологические факторы перейдут в разряд быстрых переменных, а медленными («параметрами») станут внешние условия, например такие, как структура и состав почвы, обеспеченность водой и т. д.

Из системы (1) почти очевидно, что переменные α можно считать постоянными (параметрами) на изучаемом отрезке времени «с точностью до ε»:

$$\alpha(t)=\alpha_0+\varepsilon f(t).$$

Очень непростые математические соображения (Боголюбов, 1955) показывают, что и с быстрыми переменными можно поступить аналогично. Однако роль параметров β будут играть средние значения быстрых переменных, а не мгновенные значения переменной, как в случае медленных переменных:

$$\beta_0\approx\frac{1}{\Delta t}\int\limits_{\Delta t} y(\tau)\,d\tau.$$

Итак, выделение определенного уровня приводит к расщеплению системы на переменные x и параметры α и β.

Параметры α — мгновенные значения «медленных» (по сравнению с x) переменных. Параметры β — средние значения «быстрых» (по сравнению с x) переменных. Вектор x содержит столько компонентов, сколько есть сравнимых по скорости процессов данного масштаба в системе.

Эти рассуждения — «трехуровневая схема» — позволяют записать изучаемую модель в виде

$$\frac{dx}{dt}=g(x,\ \alpha,\ \beta). \qquad (2)$$

Иногда подобное «одноуровневое приближение» позволяет радикально расправиться с «проклятием размерности» — существенных переменных (x) может оказаться всего два-три. Однако эти соображения еще не избавляют от «проклятия размерности» по числу параметров.

Стационарные состояния. Статистические методы. Для наших целей несущественно различие в происхождении параметров α и β. А большое количество этих параметров имеет, наоборот, принципиальное значение.

На первый взгляд, кажется, что мы ничего не достигли — вместо изучения одной громоздкой системы нам придется «разгребать» нагромождение простых систем. Присмотримся, однако, ближе к проблемам, которые при этом возникают.

Важнейшая тема — стационарные состояния x_0 изучаемой системы:

$$g(x_0, \alpha, \beta)=0. \tag{3}$$

Решение этой системы уравнений определяет стационарные значения переменных x_0 как функции параметров α, β.

Для того чтобы подчеркнуть важность этих величин, введем обозначения $a_к=x_{0к}$ и будем называть их уровнями переменных:

$$a=x_0=f(\alpha, \beta). \tag{4}$$

Таким образом, небольшое число переменных a зависит от огромного количества параметров α и β. По-видимому, именно это обстоятельство является главной (если не единственной) причиной увлечения биологов статистическими методами.

Конспективно (и поэтому несколько огрубленно) ситуацию можно описать так: рассмотрим приращение вектора x_0:

$$\Delta a \approx \sum_i A_i \Delta\alpha_i + \sum_k \beta_k \Delta\beta_k. \tag{5}$$

В такой линеаризованной записи Δx_0 выглядит как сумма большого числа независимых (или коррелированных) случайных величин $\Delta\alpha$, $\Delta\beta$, и мы попадаем в привычное русло теоретико-вероятностных методов.

Конечно, формула (5) очень груба, и следовало бы учесть хотя бы квадратичные члены; начиная с этого момента мы не будем различать α и β, иначе формулы будут слишком громоздкими. Выпишем квадратичное приближение, помня, что некоторые из α есть на самом деле β:

$$\Delta a \approx \sum_{i=1}^{N} A_i \Delta\alpha_i + \sum_{l=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} A_{lm} \Delta\alpha_l \Delta\alpha_m. \tag{6}$$

Эта формула показывает, почему затруднительно, конечно, в рассматриваемом круге задач, сочетание даже простейших нелинейностей с вероятностными подходами. Если нам внушало серьезное беспокойство уже количество (N) линейных членов, равное числу параметров, то количество (N^2) квадратичных членов способно оказать еще более вредное воздействие на исследователя.

«Наблюдаемые величины» и параметры. Свои «нептунисты» и «плутонисты» возникают в переломный момент любой науки, а не только геологии. Можно поэтому математикам попытаться извлечь урок из трудностей геологов. Кризис в теории элементарных частиц породил экстремистов и среди них такого серьезного физика, как Гейзенберг, требовавших полностью изгнать из теории «ненаблюдаемые» величины (наши α!) и оставить только наблюдаемые (наши x). Приведенная аналогия, может быть не очень глубока [1], но полезна.

Попытаемся извлечь максимум пользы из наблюдаемых данных. Возможно, конечно, что теоретический анализ потребует измерения неожиданных типов величин, не тех, что привычны в полевых исследованиях. Не следует, однако, безоговорочно считать это обстоятельство только капризом теоретиков. Напротив, в некоторых случаях такой подход позволяет правильно организовать сбор данных, помогает выработать некую общую методику.

Приходится, однако, считаться с обоснованным недоверием экспериментаторов к введению теоретических параметров. Уровни a наблюдаются непосредственно в эксперименте или в полевых условиях. Параметры α могут быть найдены только косвенно-численной обработкой и, обыкновенно,— много позже наблюдения, осенью или зимой, когда уже не поставишь контрольного наблюдения. Значения параметров обычно весьма чувствительны к неизбежным погрешностям наблюдения.

Тем не менее введение параметров неизбежно, ибо сама постановка вопроса об управлении продукционными процессами вынуждает рассматривать параметры, ибо управление — регулирование водного режима, внесение удобрений — является, по существу, изменением параметров системы.

Отмеченные неудобства обращения с параметрами могут быть устранены на основе применения теоретического анализа. Необходимо, во-первых, изучать существенные параметры; во-вторых, предлагается определенный экспериментальный подход, основная особенность которого — динамическое, а не статическое, рассмотрение, изучение, качественное и количественное, линейного переходного процесса. Такой подход сближает нашу проблему с перспективной идеей мониторинга — непрерывного слежения за системой. Кроме того, анализ линейного переходного процесса облегчает автору переход к основной теме статьи — спонтанным нелинейным переходным процессам — кривым роста.

Существенные параметры. Вернемся к рассмотрению системы (2). До сих пор мы обсуждали только ее стационарные состояния. Сделаем следующий шаг и рассмотрим ее устойчивость. Классическая теория устойчивости требует вычисления матрицы L_{ik} линеаризованной системы и последующего изучения собственных чисел этой матрицы L.

Запишем систему (2) несколько подробнее, явно указывая индексом компоненты вектора x:

$$\frac{dx_i}{dt} = g_i(x_1, \ldots, x_n; \alpha_1, \ldots, \alpha_N). \tag{7}$$

---

[1] В физике — принципиальная ненаблюдаемость, а у нас — всего лишь выбор арсенала средств измерения.

Для дальнейшего важно, что n невелико. Оно много меньше, чем N:

$$n \ll N. \tag{8}$$

А если задача особенно удачная (для теоретика!), то n может стать даже единицей, двойкой.

Коэффициенты матрицы вычисляются через производные правых частей по аргументам:

$$L_{ik} = dg_i/dx_k, \tag{9}$$

причем после дифференцирования надо вместо x-в подставить их значения (a) в стационарной точке:

$$a_k = x_{k0} = f_k(\alpha_1, \ldots, \alpha_N). \tag{10}$$

Следовательно, и уровни a_k, и коэффициенты L_{ik}:

$$L_{ik} = L_{ik}(\alpha_1, \ldots, \alpha_N), \tag{11}$$

являются функциями только параметров α и ничего больше (впрочем, и этого достаточно — ведь параметров N штук).

С математической точки зрения, любые линейные комбинации и даже нелинейные функции параметров равноправны, и мы можем произвольно переходить от одной системы параметров к другой.

Составим поэтому «хороший» список параметров, в котором будут содержаться n чисел a_k и n^2 чисел L_{ik}. Более того, подчеркивая нашу тенденциозность, присвоим этим параметрам первые номера — сначала занумеруем все стационарные уровни a_k, а затем — коэффициенты L_{ik}.

Экспериментатор легко, вероятно, согласится с предложением считать a_k параметрами: ведь уровни можно измерить. Серьезные возражения встретит, однако, у многих предложение считать параметрами столь абстрактные (на первый взгляд) и уж, во всяком случае, непривычные величины L_{ik}. Отложим вопрос о «наблюдаемости» и разберем здесь другой, не менее важный вопрос.

Что дает такая постановка вопроса? По мнению автора,— довольно много. В самом деле, систему (7) в этом случае можно записать в виде

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_k L_{ik}(x_k - a_k) + \ldots \tag{12}$$

Таким образом, неопределенность, статистика, индетерминизм как бы отступили в члены более высокого порядка. В главных членах мы не только знаем стационарные состояния (уровни a_k), но и можем построить фазовый портрет системы (12) — определить всю картину переходных процессов.

Естественно поэтому назвать числа a_k и L_{ik} существенными параметрами системы. Нужно только особо подчеркнуть то, что они являются существенными для стационарных режимов и линейных переходных процессов. С иной точки зрения существенными могут оказаться совсем другие параметры.

Таким образом, существенных параметров немного — их всего $n+n^2$ штук.

Идеи А. М. Ляпунова были той путеводной звездой, которая привела нас к избавлению от «проклятия размерности» не только в переменных, но и в параметрах.

Линейные переходные процессы. Уровни a_k, как уже было сказано, допускают прямое измерение. Совсем иное дело параметры L_{ik}. Если система находится в стационарном состоянии, то никакое измерение их не обнаружит. Это видно из формул (12), где L_{ik} умножаются на нулевые разности.

Однако именно L_{ik} определяют характер возвращения в положение равновесия при малом возмущении стационарного уровня. Очень важна оговорка о малости возмущения, ибо в противном случае становятся существенными нелинейные члены, а система (12) перестает быть пригодной для описания поведения.

Известно, что решение линейной системы является линейной комбинацией показательных функций:

$$x_k(t) = a_k + \sum c_{km} e^{\lambda_m t}, \tag{13}$$

где λ_m — собственные числа (вообще говоря, комплексные) матрицы L_{ik}.

Существуют методы, позволяющие найти не только собственные числа, но и все элементы матрицы L_{ik}. Правда, для математика более привычна задача интегрирования системы дифференциальных уравнений. Здесь же приходится решать обратную задачу: даны решения, требуется восстановить систему.

Задача, казалось бы, должна быть простой — ведь нам нужно найти всего лишь несколько чисел L_{ik}, а в нашем распоряжении имеется значение x_i в любой момент времени. Данных, следовательно, сколько угодно, можно часть из них использовать для вычислений и оставить еще данные для контроля.

Однако здесь возникает характерное противоречие. Для того чтобы можно было применить линейное приближение, разности $x_k - a_k$ должны быть как можно меньше. Но, если они будут слишком малы, неизбежная погрешность измерений не оставит ни одного верного знака в этих разностях. Отсылая читателя за подробностями к специальной литературе, подчеркнем еще раз важную мысль.

Если измерения производились без учета особенностей вычислительной обработки (например, необходимость вычисления разностей и неизбежная потеря знаков), то они могут оказаться совершенно бесполезными.

Существенный методологический вывод: уже на стадии планирования эксперимента необходима правильная математическая модель.

Критические режимы. Мы заимствовали еще не все полезное в идеях Ляпунова. Поставим следующий по трудности вопрос. Всегда ли a_k и L_{ik} образуют полный[1] список существенных параметров?

Теория устойчивости помогает и здесь — линейные члены являются определяющими только для устойчивых режимов. И, наконец, в критических точках существенными становятся квадратичные и кубичные члены, словом, нелинейные.

Рассмотрим движение в пространстве параметров к критической точке. Как происходит потеря устойчивости?

Хорошо изучен следующий случай: в устойчивую точку стягивается неустойчивый предельный цикл и происходит жесткое возбуждение колебаний. Эта картина обсуждается на всевозможных симпозиумах и конференциях. Автор (Молчанов, 1967) является горячим сторонником «колебательного подхода» к биологическим вопросам. Было бы, однако, неоправданной однобокостью подходить к этим вопросам лишь с этой точки зрения.

Вернемся, однако, к математике. Оставим в нашей системе одно медленное переменное. Вспомним, что существенные параметры также меняются со временем, хотя и медленнее, чем основные переменные:

$$\frac{dx}{dt}=g(x,\alpha),\quad \frac{d\alpha}{dt}=\varepsilon f(x,\alpha). \tag{14}$$

Если же нас интересует только стационарный уровень a, корень уравнения:

$$g(a,\alpha)=0, \tag{15}$$

то мы можем не обращать внимания на медленные переменные, пока этот уровень устойчив.

Но, когда «эволюция параметра» α приводит к потере устойчивости этого состояния, происходит «переброс» в другое устойчивое состояние. Очевидна глубокая математическая аналогия такой ситуации с жестким возбуждением колебаний.

Полезно разобрать на примере, как происходит этот процесс. Для простоты разберем предельную ситуацию, когда исходный уровень неустойчив и происходит переход на устойчивый уровень. Для описания двух уровней достаточно, чтобы функция g была квадратична по аргументу x. Параметр α мы вообще рассматривать не будем — он уже сделал свое дело, разрушив устойчивость изучаемого уровня.

[1] Мы стоим, конечно, на локальной точке зрения. Все рассмотрение ведется в окрестности данного стационарного состояния. Само собой разумеется, что для исследований в целом знания этих параметров недостаточно.

Если отсчитывать переменную x от «разрушившегося» уровня, то надлежащим выбором масштабов x и t функцию $g(x)$ можно привести (только для случая квадратичной $g(x)$!) к канонической форме:

$$\frac{dx}{dt}=x(1-x). \tag{16}$$

Решение этого уравнения—хорошо известная «логистическая» кривая:

$$x=l^t/(1+l^t). \tag{17}$$

Это, можно сказать, «праматерь» всех S-образных кривых. Выход по этой кривой на новый уровень — единица — происходит,

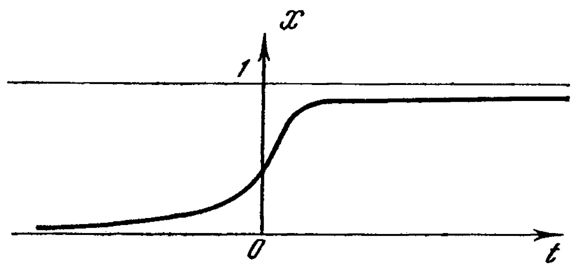

Рис. 1. Логистическая кривая

строго говоря, за бесконечное время. Эта идеализация — «расплата» за переупрощение задачи, за то, что мы пренебрегли медленными переменными.

Кривые роста. В биологии, химии, радиотехнике и других областях естествознания S-образные кривые служат для описания многих важных явлений. Полезно поэтому попытаться выработать общую точку зрения на это понятие.

Теория нелинейных процессов[1], как уже было сказано, подсказывает общую идею рассмотрения «переброса» из состояния, ставшего неустойчивым, в стабильный режим. Возникает интересная математическая задача классификации таких переходных режимов. Читатель должен обратить внимание на то, что этот термин значительно шире своего предшественника из радиотехники, где в основном рассматриваются линейные системы. Рамки данной работы не позволяют провести подробного математического анализа. Автор надеется восполнить этот пробел в будущем. Здесь мы ограничимся перечислением нескольких, наиболее важных особенностей, непривычных для классической логистической кривой.

---

[1] Более привычное название «колебания» в данном случае является дезориентирующим, ибо суть дела как раз в том, что колебания не возникают.

Первая особенность — новое стабильное состояние — может достигаться строго за конечное время уравнением

$$\frac{dx}{dt} = (1-x)^{1/2}, \tag{18}$$

аккуратное рассмотрение которого предполагает изучение систем на плоскости. Не задерживаясь на этом (впрочем, весьма важном) обстоятельстве, укажем только, что уравнение (18) допускает интегрирование в квадратурах:

$$t = t_0 + \int_{x_0}^{x} (1-\xi)^{-1/2} d\xi, \tag{19}$$

и возникающий несобственный интеграл сходится. Соответствующий график показан на рис. 2. Следующий пример близко

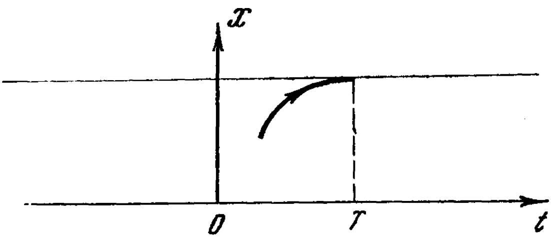

Рис. 2. Выход на равновесие за конечное время

примыкает по идее к предыдущему, но отличается характером кинетики (рис. 3).

Еще более интересны и важны переходные процессы в трехмерных системах. Там достижение нового равновесия не обязано происходить монотонно.

Суть дела состоит в том, что мы обычно наблюдаем только одну переменную из двух-трех существенных.

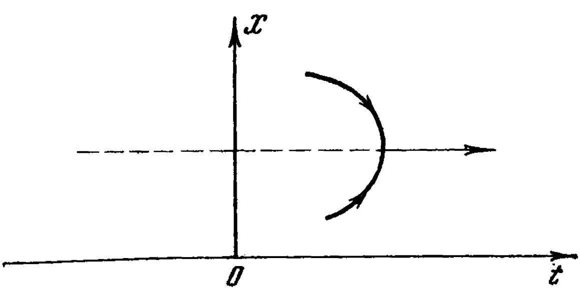

Рис. 3. Слияние трех состояний и вертикальная касательная в момент достижения равновесия

Математик может по этому поводу с удовлетворением отметить полезность даже качественных утверждений своей науки. Можно, например, строго доказать, что в одномерном случае возможен только монотонный переходный процесс. Если поэтому экспериментатор наблюдает процесс, похожий на изображенный на рис. 4, то можно с уверенностью утверждать существование, по крайней мере, еще одной существенной переменной, кроме x.

Эти замечания нуждаются, конечно, в развитии и уточнении. Они приведены для иллюстрации главной мысли автора — математика полезна для естествознания прежде всего хорошо

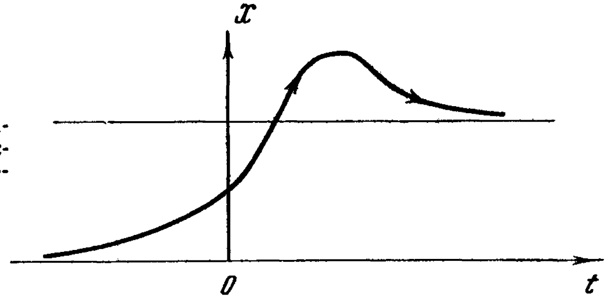

Рис. 4. Немонотонный характер переходного процесса, типичный для двухмерных и трехмерных систем

разработанным арсеналом понятий и методами логического анализа.

Роль вычислительной техники вторична — она необходима на заключительном этапе работы, когда следствия теоретического качественного анализа фиксируются количественной моделью.

Распространение в настоящее время мощных компьютеров ставит исследователя в затруднительное положение: он оказывается между Монбланом экспериментальных данных и Эверестом насчитанных графиков без представления о том, как связать одно с другим. Громоздкие модели (например, Imitation Modelling) некорректны в смысле неустойчивости при малом изменении параметров.

Автор видит выход в тщательном отборе ведущих (элементарных) явлений и объектов, построении для них строгих (предельных) моделей с последующим уточнением и привязкой к эксперименту методами теории возмущений.

ЛИТЕРАТУРА

Боголюбский Н. Н., Митропольский Ю. А. 1955. Асимптотические методы теории нелинейных колебаний. М., Гостехиздат.

Молчанов А. М. 1967. В сб.: Колебательные процессы в биологических и химических системах. М., «Наука».