

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

А. М. Молчанов

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
В ЭКОЛОГИИ.
РОЛЬ КРИТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ

ПУЩИНО-на-ОКЕ

1973

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

А. М. Молчанов

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
В ЭКОЛОГИИ.
РОЛЬ КРИТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ

ПУЩИНО-на-ОКЕ

1973

УДК 577. 4:51. 001. 57

Работа посвящена методическим вопросам математического моделирования в экологии. Подчеркнута ограниченная применимость вычислительной техники. Обсуждается роль критических режимов и возможность создания достаточно полной теории этих режимов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Экология – одна из наиболее сложных, наиболее комплексных биологических дисциплин. Экосистемы едва ли не самые трудные для изучения из всех систем, с которыми приходится иметь дело в науке. Сама постановка вопроса об изучении экосистем стала возможной только в двадцатом веке. Это достаточно выразительно характеризует объемность проблемы.

В любую экосистему входят как биотические, так и косные (абиотические) элементы. Поэтому достаточно полное изучение экосистем невозможно без самого прямого участия наук геологического и географического цикла. Они нужны при описании геологических, ландшафтных, гидрографических и климатических характеристик. Методы химии и физики абсолютно необходимы (но, к сожалению, совершенно недостаточны) при изучении составных элементов косной компоненты экосистемы.

Суть и содержание экосистемы – живые существа, растения и микроорганизмы – предмет изучения всего комплекса наук биологического цикла.

Невозможно обойтись и без социально-экономических наук, ибо основная цель науки – использование биосферы для нужд человечества. Стоит, видимо, добавить – для человечества, поднимающегося над чисто эгоистическим “использованием” и вырастающего до понимания своей роли хранителя биосферы. Непросто взаимодействие экосистем с быстро развивающейся техникой, остро нуждающейся в разнообразных типах сырья, которые она черпает в экосистемах. С другой стороны, уже становится общим местом мысль об опасности необратимого загрязнения окружающей среды.

Науки математического цикла также должны найти свое место в этой важной проблеме. Можно указать, например, на статистические методы при количественных оценках структуры экосистем. Развивается системный подход при описании и классификации многообразных внешних и внутренних связей экосистем. Не потеряли своего значения и более традиционные аспекты изучения изменения систем во времени как в эволюционном, так и в сукцессионном (возрастном) плане.

Уже этот беглый перечень демонстрирует всю громадность проблемы. Возникает даже невольное сомнение – а готова ли сегодняшняя наука, состоящая из весьма разобщенных разделов, к решению подобных комплексных проблем? К сожалению, уйти от вопроса нельзя – он поставлен самой жизнью и стихийное его решение дорого обойдется и человечеству и биосфере. Наиболее правильна, по-видимому, постановка вопроса о выделении самых острых, животрепещущих проблем.

2. ОСОБЕННОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Правильное выделение главных направлений исследования и моделирования требует четкого понимания специфических черт биологических систем. Очень обобщенно можно указать на четыре важнейшие особенности живого:

- а. Сложность внутреннего строения каждой отдельной особи.
- б. Полифакторность внешней среды (условий жизнедеятельности).
- в. Незамкнутость (проточность) как в энергетическом, так и в структурном или информационном смысле.
- г. Существенная нелинейность – огромный диапазон внешних характеристик, при которых сохраняется жизнеспособность систем.

Несколько слов по каждому из разделов.

2а. Сложность строения

Этот раздел можно было бы (при желании) озаглавить иначе – “Уважение к биологическому объекту”. Сколько-нибудь полное описание даже простейшего биологического объекта требует всей суммы знаний, накопленных в “предбиологическом” естествознании.

Поясним простым примером эту мысль. В популярной литературе всегда приводят пример колеса, когда хотят польстить самолюбию человечества и показать, что биология “до колеса не додумалась”. Но если понимать под “принципом колеса” идею замены трения скольжения трением качения, то любые шагающие, прыгающие и бегающие животные реализуют этот принцип намного более гибко, чем неудобное и громоздкое техническое сооружение, именуемое колесом. Если же поставить вопрос глубже – о циклических процессах преобразования энергии, то биология “придумала” великолепный принцип “химического колеса” – преобразование химической энергии в механическую во всех процессах мышечного сокращения. О таком преобразователе в технике можно пока только мечтать.

С чисто математической точки зрения сложность строения системы означает, что описание ее или задание ее состояния требует задания многих чисел. Скажем это на математическом языке: фазовое пространство биологической системы многомерно.

2б. Полифакторность среды

Биологические объекты сложны не только внутренне. Они функционируют в сложной, нередко быстро изменяющейся среде. Более того, есть серьезные основания думать, что самая сложность их строения носит “компенсаторный” характер. Они именно потому и сложны, чтобы в ответ на любое воздействие среды развить внешнюю защитную реакцию таким образом, чтобы сохранить максимально неизменной свою внутреннюю структуру. Особенно тщательно оберегается, конечно, генная, наследственная, структура.

Можно даже осмелиться сказать, что сегодняшняя сложность биологической особи – это запасенный впрок “опыт общения со средой” ее “мамы”, “бабушки”, “прапра... бабушки”.

Математическое следствие. Математическая модель биологической системы должна содержать много параметров (непрерывных и дискретных), задающих сложную среду, в которой функционирует изучаемая система.

2в. Проточность

Биологические системы никогда не бывают замкнутыми энергетически - это знают сейчас даже школьники. Существуют, однако, и более тонкие аспекты этого важного свойства. У большинства высших растений орган фотосинтеза - листья. Но в средней полосе деревья на зиму сбрасывают листья, которая становится частью среды. Еще более сложно взаимодействие со средой у насекомых, проходящих, например, стадии гусеницы и куколки. Эту особенность живого можно назвать "морфологической, структурной проточностью", или незамкнутостью. Почти очевидны примеры информационной проточности. Скажем, "химическое общение" у социальных насекомых.

Но отсюда вытекает принципиальный (хотя и грустный для математика-"модельера") вывод:

Необходимо совместное моделирование как биологической системы, так и среды ее функционирования.

2г. Нелинейность

Диапазон изменения условий, в которых нормально работают и биологические системы (например, органы зрения и слуха), значительно больше диапазона, скажем, амплитуд и частот физических приборов или технических устройств.

Во многих физических теориях вполне эффективно линейное приближение, описывающее малые отклонения от положения равновесия. Учет квадратичных поправок обычно существенно повышает точность модели. Необходимость введения нелинейности более высокого порядка нечасто встречается в "предбиологическом" естествознании.

Совсем иное положение дел в биологии. Там невозможно ограничиться даже сколь угодно высокими степенями. Нелинейность в биологии имеет, так сказать, экспоненциальный характер. Наиболее ярко это проявляется в физиологическом "законе Вебера-Фехнера", устанавливающем логарифмическую зависимость реакции от воздействия.

Эволюционный смысл столь мощной нелинейности вполне понятен: надо услышать шорох ползущей змеи и не ослепнуть при близкой вспышке молнии.

Те биологические системы, которые не смогли охватить громадный диапазон жизненно значимых воздействий среды, попросту вымерли, не выдержав борьбы за существование. На их могилах можно было бы написать: "Они были слишком линейны для этого мира".

Но такая же судьба ожидает и математические модели, не учитывающие этой важной особенности жизни.

3. СЛОЖНЫЕ ПРЕДБИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ. ГРАНИЦЫ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ

В естествознании существуют объекты, для которых построены достаточно полные математические модели. Так, например, небесная механика описывает движение планет со всей точностью, на которую способны современные средства наблюдения. В этом смысле можно говорить о точной (по состоянию на 1973 год) модели явления. Другой крайний случай - квантовая механика, описывающая структуру атома.

С принципиальной точки зрения нет оснований сомневаться, что уравнение Шредингера описывает поведение молекул с весьма высокой точностью. Это, во всяком случае, должно быть справедливо для небольших молекул, таких, например, как бензольное кольцо C_6H_6 .

На этом примере можно наглядно продемонстрировать границы возможностей вычислительной техники. Попробуем (мысленно) просчитать на ЭВМ простейшую квантовомеханическую модель бензола - уравнение Шредингера для 24-х электронов. Мы

берем только по четыре валентных электрона на каждый из шести атомов углерода, откидывая внутренние (спаренные) электроны и пренебрегая движением ядер. При таком упрощении возникает уравнение в частных производных для Ψ -функции, зависящей от 72 (= 24 x 3) переменных. Применяя стандартные вычислительные методы, используем разностную схему, взяв лишь десять точек (а это очень мало, надо бы сто) по каждой из переменных. Всего у нас получится внушительное число точек:

$$N = 10^{72}.$$

Чтобы оценить всю солидность этого числа заметим, что современные ЭВМ способны производить не более миллиарда ($n = 10^9$) операций в секунду. Предположим даже, что инженерам удастся повысить мощность ЭВМ еще в миллиард раз, $n = 10^{19}$, операций в секунду. Но и в этом (ныне совершенно фантастическом) предположении получается время T , $T = 10^{54}$ сек, невообразимо превышающее время T_0 существования Земли: $T \gg T_0 = 5 \cdot 10^9$ лет = $1,5 \cdot 10^{17}$ сек. И все это время T необходимо для того только, чтобы сделать один-единственный шаг по расчету бензольного кольца прямым методом.

4. ТОЧНЫЕ, ПРИБЛИЖЕННЫЕ И ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ МОДЕЛИ

Техническая неосуществимость прямого просчета точной модели какого-нибудь явления возможна, конечно, не только в биологии. Но в биологии это случается особенно часто. Это не означает, конечно, бесполезности точных моделей, но это означает необходимость тесного взаимодействия с чистой и прикладной математикой. Хорошо отработанная приближенная модель нередко радикально уменьшает объем вычислительной работы. Так, например, квантовая химия есть не что иное, как приближенный метод решения уравнения Шредингера для молекул. Квантовая химия позволяет вычислить важные (обычно энергетические) характеристики не слишком сложных, но достаточно типичных молекул и активных групп.

Хотя мы и не можем найти решение точной квантово-механической задачи, но знание уравнения Шредингера дает возможность оценить теоретически точность приближенного решения.

Точная, пусть даже крайне сложная, математическая модель явления позволяет строить приближенные модели, отвечающие на частные вопросы. Происходит своеобразная "эмансипация" теории от эксперимента. Решающее слово остается, разумеется, за экспериментом. Но "Его Величеству Эксперименту" предоставляется возможность дать однозначный, "незамутненный" ответ.

Справедливость квантовой механики, например, не нужно проверять на молекулах. Проверка теории идет на элементарном объекте (в данном случае на атоме) и притом достаточно простыми и точными экспериментами.

Мораль для математика. Частные и предельные случаи теории важны не только сами по себе, но и как способ экспериментальной проверки полной точной модели.

5. ВОЗМОЖНА ЛИ АКСИОМАТИКА БИОЛОГИИ?

До последнего времени развитие математики стимулировали (главным образом) запросы механики, физики, техники. Возникла даже метафора "точное естествознание". Именно в рамках этого (сравнительно узкого) цикла дисциплин сформировался аксиоматический идеал построения науки.

Суть идеала - установление (пусть даже экспериментальное) основных постулатов, но затем строго логическое построение всей остальной теории. Этот идеал буквально выстрадан всей историей становления естествознания как общественной и духовной силы.

Привлекательность идеала очевидна. Тщательному уточнению, скрупулезной экспериментальной проверке подлежит лишь сравнительно небольшой набор постулатов. Следствия же из них (модели частных явлений, как сейчас более модно писать и говорить) axiomatically улучшаются по мере уточнения постулатов.

В наиболее прозрачной, классической форме этот идеал реализован в эллиптической (эвклидовой) геометрии. Значительно сложнее axiomatic structure следующего крупного этапа научной мысли – небесной механики. В ней роль axioms играют уравнения движения, опирающиеся на закон всемирного тяготения. Далеко не все следствия легко обозримо. Так, например, проблема трех тел до сих пор не имеет удовлетворительного решения, хотя любое частное движение нетрудно найти современными вычислительными средствами.

Еще сложнее axiomatics квантовой механики. Ее основной постулат – уравнение Шредингера – является уравнением в частных производных. Оно допускает точное решение только в простейших (хотя и важнейших) частных случаях. Чисто вычислительные подходы, как уже было сказано, чрезвычайно трудоемки и пока нереальны.)

Все это, по-видимому, показывает, что axiomatic ideal характерен, к сожалению, для "предбиологического" естествознания. Однако этот грустный вывод относится только к биологии в целом.

Совершенно несомненно, что ее значительные отрасли (и притом совсем не обязательно близкие к нынешнему подразделению на частные дисциплины) не только могут, но и должны быть построены именно по axiomatic ideal.

Ниже приводятся некоторые соображения в пользу этой точки зрения.

6. "ИЕРАРХИЯ" И МАЛЫЙ ПАРАМЕТР

В прошлом веке была создана клеточная теория строения животных и растений. Это, вероятно, наиболее трудный и принципиальный шаг к "атомизму" в биологии, исторический сдвиг в понимании иерархичности, дискретности, "некисельности" форм существования жизни.

Популяция состоит из организмов. Организм состоит из клеток. При всем глубочайшем различии популяции и организма есть между ними и глубокое сходство, позволяющее употребить оба раза один и тот же глагол "состоит". Клетки органа (или клеточные ткани) взаимодействуют, конечно, друг с другом. Однако эта связь значительно слабее внутриклеточных связей. Относительная слабость межклеточных связей эффективно используется в эксперименте. Исследователь подбирает внешние воздействия (механические, химические или физические) настолько сильны, чтобы вызвать распад клеточной ткани на отдельные клетки. Замечательно, что этого можно добиться, сохранив полностью неповрежденной структуру и функцию каждой отдельной клетки.

Отношение величины (неважно чего именно – силы или кислотности, напряжения или температуры) воздействия "разъединяющего" к величине "разрушающего" воздействия есть – как говорят в математике – "безразмерный малый параметр".

Подобные малые параметры характеризуют количественно "меру индивидуальности" клетки в ткани. Очевидно обобщение этой идеи "вверх и наружу" – к биогеоценозам и биосфере, а также "вниз и внутрь" – к клеточным организмам и макромолекулам.

Невозможно переоценить значение этой замечательной особенности живого для эффективности математических методов в биологии.

7. СОСЕДНИЕ УРОВНИ

Математика имеет дело с той реальностью, что и все остальное естествознание. Отличаются, однако, методы, подход, точка зрения. Математика чаще изучает связи,

отношения, аналогии явлений, нежели их фактическое воплощение, реализацию. Неизбежен, конечно, проигрыш в конкретности. Но он с избытком (а только такие темы и стоят труда) компенсируется выигрышем в общности, в количестве приложений.

Ихтиолог, например, прогнозирующий, скажем, численность некоторого вида рыб, работает обычно на уровне популяционном, не "опускаясь" до молекулярного уровня, но и не "поднимаясь" до биосферного.

Эта возможность не учитывать соседние ("вверх и вниз") уровни имеет общий характер и тесно связана с идеей малого параметра. Точнее говоря, двух малых параметров, причем эти параметры приобретают иную - кинетическую, временную - интерпретацию.

Среду можно считать почти постоянной - она меняется весьма медленно на тех временах и на тех расстояниях, которые характерны для изучаемого объекта. Это и есть иное - кинетическое - обличье малого параметра, меры индивидуальности. Внутреннюю среду объекта также можно считать постоянной, точнее, зависящей только от существенных переменных, описывающих изучаемый объект. Однако причина, в некотором смысле, противоположна. Субъединицы (например, особи в популяции или клетки в особи) движутся, изменяются, колеблются столь быстро, что достаточно учитывать только средние значения этих быстрых переменных. Наиболее глубокое выражение эта идея находит в известной теореме Андрея Николаевича Тихонова об уравнениях с малым параметром при старшей производной. Впрочем, ее частные приложения формулировались, по-видимому, и независимо - например "метод стационарных концентраций" в химической кинетике.

Стоит ли ломиться в открытую дверь и "доказывать математически" возможность исследований в пределах одного уровня? Разумеется не стоило бы, если бы не два обстоятельства.

Во-первых, невозможно оставаться в рамках одного уровня и нужно знать границы применимости "одноуровневой" схемы.

Нельзя, например, понять закономерности важнейших миграционных явлений только на популяционном уровне без физиологического (и даже биохимического) анализа стрессовых факторов. Математика помогает понять общую причину "прорыва соседнего уровня" - потерю устойчивости изучаемой системой.

Во-вторых, математические аналоги позволяют иногда смоделировать изучаемое явление на другом, более доступном эксперименту, уровне. Уже одно упоминание о "лавином" характере некоторых миграционных процессов есть указание на физическую модель-аналогию.

8. КРИТИЧЕСКИЕ РЕЖИМЫ, В ЧАСТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ

Сложность биологических явлений обычно очень велика. Даже в рамках одного уровня, даже "занулив" все, какие только удастся найти, дополнительные малые параметры, упростив и откинув все, что только можно упростить и откинуть, редко получают обозримую модель.

В таких случаях может помочь следующий методологический прием. Изменением параметров модели (или условий эксперимента, а лучше и "условий эксперимента") сознательно и целенаправленно выводят систему на границу устойчивости. В таких критических ситуациях число существенных переменных обычно невелико, часто всего только две переменные. Разумеется, в других условиях "критичной" может оказаться совсем другая пара или несколько переменных. Но если удалось добиться выхода на "линию нейтральности", то структура и свойства изучаемой системы во многом проясняются.

Удается чисто математически найти все возможные типы кинетики любой системы, попавшей в подобную критическую ситуацию. Это (хорошо известные из радиотех-

ники) мягкий и жесткий режимы возбуждения автоколебаний. Возможен, кроме того, релаксационный аналог этих режимов (взрыв или мономолекулярный распад, а также их комбинация, например дифференцировка тканей в эмбриогенезе). Все эти режимы, конечно, давно и хорошо изучены теоретически.

Существенно, однако, что в любой, как угодно сложной, системе простейший тип потери устойчивости стационарного режима непременно будет протекать по одному из четырех указанных типов кинетики. Математические модели радиоактивного распада (важнейший пример мономолекулярной реакции) или лампового генератора – это не примеры, а типичные представители, канонические формы самых сложных систем.

Очевидно насколько возрастает с усвоением этой идеи наше уважение к подобным моделям.

9. ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ АСПЕКТ МЕТОДА КРИТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ

Экологические системы относятся как раз к таким объектам, где следовало бы законодательно запретить применение методов, столь сочувственно описанных в предыдущем пункте. В сущности, в этом и состоит одна из важнейших целей всей программы "Человек и биосфера" – научиться не выводить экосистемы на край гибели. Именно для этого надо "загонять" в кризис их модели. "Знай край, да не падай!".

К сожалению, поведение человечества в целом лучше всего характеризуется русской поговоркой: "Гром не грянет – мужик не перекрестится". Хорошо известно, что немало различных экосистем поставлены как раз в критические условия (и сейчас уже несущественно по невежеству ли, или по узколобому эгоизму людей).

Приходится поэтому превращать нужду в добродетель и ставить вопрос о первоочередном и тщательном, максимально объективном изучении, сборе материалов, наблюдении и разумном вмешательстве в кризисных ситуациях.

Метод моделирования критических режимов наиболее эффективен как раз в таких ситуациях, когда моделирование всего более необходимо.

Подходы системного анализа, тщательный учет всевозможных сложнейших, трудно обнаруживаемых, связей неминуемо должны быть дополнены количественными оценками относительного значения этих связей. Необходимо сопоставить различные модели, исходящие из альтернативных гипотез о ведущих переменных, и сравнивать модельные выводы с полевыми, экспериментальными, наблюдательными данными.

10. "УЗКОЕ МЕСТО" И РЕГУЛЯЦИЯ

После создания Чарлзом Дарвином теории эволюции мы уже довольно ясно представляем себе процесс возникновения регуляторных механизмов. Идея малого параметра, независимо возникшая и в жизни (особенно в биохимии) под названием "узкое место" в реакции, помогает понять картину эволюционного становления управляющих систем, во всяком случае некоторых из них. Первоначально это "наиболее обнаженное", "самое уязвимое" место или стадия. Затем система либо вымирает (как вид), либо "берет в свои руки" контроль * над "узким местом".

* Так, например, повышение концентрации углекислого газа возбуждает дыхательный центр.

Вообще закрепление бывшего "отравителя" и постепенное превращение его в нынешнего "управителя" есть, по-видимому, одно из самых удивительных изобретений эволюции.

Может быть, стоит поэтому предоставить все благодетельному воздействию времени?

Так, конечно, поступить можно. Вопрос только в цене, которую заплатит биосфера, человечество и, особенно, цивилизация за стихийное регулирование.

К сожалению, в экологических системах мы не располагаем эволюционными временами. Мы вынуждены заменить последовательную эволюцию параллельным анализом.

Если, однако, мы хотим (а мы этого хотим!), чтобы к моменту окончания анализа было что регулировать, а самое главное – было кому регулировать, этот анализ неминусом должен быть модельным.

Приведенные соображения призваны осветить роль и место математического моделирования в экологических вопросах.

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ.	3
2. ОСОБЕННОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ.	4
3. СЛОЖНЫЕ ПРЕДБИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ, ГРАНИЦЫ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ.	5
4. ТОЧНЫЕ, ПРИБЛИЖЕННЫЕ И ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ МОДЕЛИ.	6
5. ВОЗМОЖНА ЛИ АКСИОМАТИКА БИОЛОГИИ?.	6
6. "ИЕРАРХИЯ" И МАЛЫЙ ПАРАМЕТР.	7
7. СОСЕДНИЕ УРОВНИ.	7
8. КРИТИЧЕСКИЕ РЕЖИМЫ, В ЧАСТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ.	8
9. ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ АСПЕКТ МЕТОДА КРИТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ.	9
10. "УЗКОЕ МЕСТО" И РЕГУЛЯЦИЯ.	9

А.М.Молчанов
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В ЭКОЛОГИИ.
РОЛЬ КРИТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ

Редактор М.Б.Бодрова

Т-13724. Подписано к печати 27/IX-1973 г. Уч.изд.л. 1,1
Тираж 150 экз. Заказ 1357Р.

Отпечатано на ротапринте в Научном центре биологических исследований АН СССР в
Пущине.