

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ КОНСТИТУТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ

Р. С. Зотина, А. И. Зотин, Е. А. Прокофьев

Конститутивными процессами мы называем процессы, связанные с изменением диссипативной функции во время развития, роста и старения организмов [Зотин, 1974; Зотин, Зотина, 1976]. Так как диссипативную функцию можно приравнять к интенсивности энергетического метаболизма организмов, то фактически, когда мы говорим о конститутивных процессах, речь идет об изменении основного обмена (интенсивности дыхания) в онтогенезе животных и растений.

Возможны два подхода, опирающиеся на термодинамические соображения, при построении количественной феноменологической теории конститутивных процессов: стохастический и феноменологический. В каждом из этих подходов имеются свои трудности, но в отличие от эмпирического построения уравнений, описывающих изменение основного обмена, эти подходы опираются на общую теорию — термодинамическую теорию развития Пригожина—Виам [Prigogine, Wiame, 1946; Зотин, 1974].

КИНЕТИКА КОНСТИТУТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ: СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Уменьшение диссипативной функции, а следовательно, и энергетического метаболизма, во время развития и роста организмов представляет собой с точки зрения теории Пригожина—Виам процесс приближения живой системы к конечному стационарному состоянию [Зотин, 1974]. С другой стороны, приближение термодинамической системы к равновесному или стационарному состоянию можно сравнить с рассасыванием крупномасштабной флуктуации [Гуров, 1978]. Поэтому теория флуктуаций и релаксации флуктуаций может лечь в основу рассмотрения кинетики приближения термодинамической системы к равновесному или стационарному состоянию [Зотина, Зотин, 1977, 1980].

Флуктуации в изолированной системе, находящейся в состоянии равновесия, описывается формулой Эйнштейна:

$$p = C \exp \frac{\Delta S}{k}, \quad (1)$$

где $p(x_1, \dots, x_n)$ — плотность вероятности отклонения параметров x_1, \dots, x_n от их значения в равновесии x_1^0, \dots, x_n^0 ; $\Delta S = S - S_0$; S_0 — величина энтропии в состоянии равновесия; k — константа Больцмана.

В некоторых случаях формула Эйнштейна может быть использована и при описании флуктуаций в неравновесных системах [Nicolis, Babloyantz, 1969; Nicolis, Prigogine, 1971; Nicolis,

1972; Гленсдорф, Пригожин, 1973]. Исходя из предположения, что она справедлива для случая конститутивных процессов, мы получили [Зотина, Зотин, 1977, 1980] зависимость диссипативной функции от плотности вероятности в следующем виде:

$$\psi = \psi_{st} + \frac{kT}{p} \frac{dp}{dt}, \quad (2)$$

где ψ_{st} — величина диссипативной функции в стационарном состоянии; k — константа, зависящая от ψ_{st} .

Как следует из уравнения (2), для получения зависимости диссипативной функции от времени, необходимо знать скорость изменения плотности вероятности p . Логично предположить [Зотина, Зотин, 1980], что

$$\frac{dp}{dt} = f(p), \quad (3)$$

где $f(p)$ — бесконечно дифференцируемая функция в окрестности точки p_{st} (в окрестности стационарного состояния системы). Разлагая эту функцию в ряд Тейлора и учитывая, что при $p = p_{st}$ $dp/dt = 0$ и, следовательно, $f(p_{st}) = 0$, получим

$$\frac{dp}{dt} = \frac{f'(p_{st})}{1!} (p - p_{st}) + \frac{f''(p_{st})}{2!} (p - p_{st})^2 + \frac{f'''(p_{st})}{3!} \times (p - p_{st})^3 + \dots \quad (4)$$

Если мы ограничимся только линейными членами разложения (4), то можно написать

$$\frac{dp}{dt} = \alpha_1 (p_{st} - p), \quad (5)$$

где $\alpha_1 = -f'(p_{st})$. Подставляя (5) в (2), имеем

$$\psi = \beta_1 \left(\frac{p_{st}}{p} - 1 \right) + \psi_{st}, \quad (6)$$

где $\beta_1 = \alpha_1 kT$. Если мы используем и квадратичный член разложения (4), то:

$$\frac{dp}{dt} = \alpha_1 (p_{st} - p) + \alpha_2 (p_{st} - p)^2, \quad (7)$$

где $\alpha_2 = +f''(p_{st})/2$. Подставляя (7) в (2), имеем

$$\psi = (\beta_1 + \beta_2 p_{st}) \frac{p_{st}}{p} + \psi_{st} - \beta_1 + \beta_2 (p - 2p_{st}), \quad (8)$$

где $\beta_2 = \alpha_2 kT$. Ранее [Зотин, 1974; Зотина, Зотин, 1977, 1980] было предложено разбиение диссипативной функции (ψ) для некоторого класса нелинейных систем на две части — функцию внешней диссипации (ψ_d) и функцию связанной диссипации (ψ_u):

$$\psi = \psi_d + \psi_u. \quad (9)$$

Сравнивая (9) и (8), а также учитывая свойства функций ψ_d и ψ_u

[Зотина, Зотин, 1977, 1980], приходим к выводу, что

$$\psi_d = (\beta_1 + \beta_2 p_{st}) \frac{p_{st}}{p}, \quad (10)$$

$$\psi_u = \psi_{st} - \beta_1 + \beta_2(p - 2p_{st}). \quad (11)$$

Очевидно, что при $p = p_{st}$ $\psi_d = \psi_{st}$. Поэтому формулу (10) можно написать в более простом виде:

$$\psi_d = \psi_{st} \frac{p_{st}}{p}, \quad (12)$$

где $\psi_{st} = \beta_1 + \beta_2 p_{st}$. Из формулы (12) вытекает следствие, которое нам пригодится в дальнейшем:

$$\omega_d p = \psi_{st} p_{st} = z, \quad (13)$$

где z — некоторая константа.

Легко показать, что соотношения типа (10)–(12) справедливы и в том случае, если использовать все члены ряда Тейлора (4). Например, они справедливы, если включить в рассмотрение кубический член разложения (4). В этом случае $\psi_{st} = \beta_1 + \beta_2 p_{st} + \beta_3 p_{st}^2$. Если включить n членов, то $\psi_{st} = \beta_1 + \beta_2 p_{st} + \beta_3 p_{st}^2 + \dots + \beta_n p_{st}^{n-1}$.

Теперь перейдем к рассмотрению кинетики изменения диссипативной функции в процессе приближения открытой системы к стационарному состоянию. Рассмотрим сначала случай, когда выполняется уравнение (5). Решая его, получаем

$$p = p_{st} [1 - C \exp(-\alpha_1 t)], \quad (14)$$

где C — положительная постоянная. Подставляя (14) в (6), имеем

$$\psi = \psi_{st} + \beta_1 \frac{C \exp(-\alpha_1 t)}{[1 - C \exp(-\alpha_1 t)]}. \quad (15)$$

Так как система близка к стационарному состоянию, то $t \gg 0$ и $C \exp(-\alpha_1 t) \ll 1$. Поэтому можно написать:

$$\psi = \psi_{st} [1 + A \exp(-\alpha_1 t)], \quad (16)$$

где $A = C\beta_1/\psi_{st}$. Это уравнение находится в хорошем соответствии с уравнением, полученным в термодинамике линейных необратимых процессов исходя из совершенно иных соображений [см.: де Гроот, Мазур, 1964].

Во время развития и роста организмы приближаются к конечному стационарному состоянию, и с определенного момента времени они попадают в линейную область, где справедливо уравнение (16). Так как в линейной области $\psi = \dot{q}_{O_2}$ и $\psi_{st} = \dot{q}_{st}$, то уравнение (16) можно записать в виде, которое поддается экспериментальной проверке:

$$\dot{q}_{O_2} = \dot{q}_{st} [1 + A \exp(-\alpha_1 t)]. \quad (17)$$

Для многих животных было показано, что эмпирические уравнения вида (17) хорошо описывают изменение интенсивности дыхания в

процессе роста организмов. Так, Броди [Brody, 1945] приводит следующие формулы, описывающие изменение основного обмена во время роста млекопитающих: у лошади $\dot{q}_{O_2} = 22[1 + 7 \exp(-0,22t)]$, у коровы $\dot{q}_{O_2} = 16[1 + 23 \exp(-0,096t)]$, у овцы $\dot{q}_{O_2} = 27[1 + 17 \exp(-0,22t)]$.

Следовательно, уравнения (16) и (17) хорошо соответствуют экспериментальным данным, полученным при изучении роста животных.

В нелинейной области следует использовать разложение (4) в полном виде. Это сильно усложняет кинетические уравнения. Поэтому ограничимся квадратичными членами [Зотина, Зотин, 1977, 1980] и запишем уравнение (7) в виде:

$$\frac{dp}{dt} = ap^2 + bp + c, \quad (18)$$

где $a = \alpha_2$, $b = -(\alpha_1 + 2\alpha_2 p_{st})$; $c = \alpha_1 p_{st} + \alpha_2 p_{st}^2$. Уравнение (18) — уравнение Риккати. Решая его, получаем

$$p = p_{st} + \frac{\alpha_1 \exp(-\alpha_1 t)}{\alpha_2 [c + \exp(-\alpha_1 t)]}. \quad (19)$$

Подставляя (19) в (10) и (11), получаем

$$\psi_d = \frac{\alpha_2 c p_{st} + \alpha_2 p_{st} \psi_{st} \exp(-\alpha_1 t)}{\alpha_2 c p_{st} + (\alpha_1 + \alpha_2 p_{st}) \exp(-\alpha_1 t)}, \quad (20)$$

$$\psi_u = \frac{\beta_1}{1 + c \exp(\alpha_1 t)}. \quad (21)$$

Учитывая (9) и (13) и то, что $\psi = \dot{q}_{O_2}$, можно написать для изменения интенсивности дыхания организмов

$$\dot{q}_{O_2} = \frac{\alpha_2 z [1 + c \exp(\alpha_1 t)]}{\alpha_1 + \alpha_2 \dot{q}_{st} [1 + c \exp(\alpha_1 t)]} + \frac{\beta_1}{[1 + c \exp(\alpha_1 t)]}. \quad (22)$$

Здесь \dot{q}_{st} — интенсивность теплопродукции в стационарном состоянии, так как $\psi_d = \dot{q}$ [Зотина, Зотин, 1977].

Для того чтобы представить себе картину изменения диссипативных функций во время развития и роста организмов, рассмотрим вопрос о знаках перед константами α_1 и α_2 . В разложении (4) $f'(p_{st}) < 0$, так как скорость изменения плотности вероятности по мере эволюции системы к стационарному состоянию убывает. Отсюда следует, что $\alpha_1 > 0$, так как в уравнении (7) $\alpha_1 = -f'(p_{st})$. Наоборот, в разложении (4) $f''(p_{st}) < 0$ и $\alpha_2 < 0$, так как в уравнении (7) $\alpha_2 = f''(p_{st})/2$. Отсюда следует, что ψ_d и ψ_u — функции, определяемые уравнениями (20), (21), должны непрерывно убывать в ходе эволюции системы к стационарному состоянию.

Для того чтобы это стало ясным, допустим, что все константы в уравнениях (20) и (21), кроме ψ_{st} , равны единице. Тогда $\psi_d = \psi_{st} (1 + e^{-t})$ и $\psi_u = 1/(1 + e^t)$. При $t \rightarrow \infty$ $\psi_d \rightarrow \psi_{st}$, а $\psi_u \rightarrow 0$, что соответствует свойствам этих функций. Так как обе эти функции убывают во времени, то должна убывать и интенсив-

ность дыхания, определяемая формулой (22). Как видно из приведенных формул, функция ψ_u сначала должна убывать быстрее, чем ψ_d , и в некоторой точке она должна пересечься. Схематически это свойство диссипативных функций изображено на рис. 47. Сопоставление кривых, показанных на рис. 47, с реальными данными, полученными при изучении изменения интенсивности дыхания и теплопродукции в оогенезе вьюна [Зотин, 1975а], в зародышевом развитии кур [Barott, 1937], во время роста рыб [Грудницкий, 1975] и насекомых [Loher et al., 1976], показало, что кинетика конститутивных процессов может быть описана уравнениями (20) — (22). В процессе оогенеза, когда живые системы наиболее удалены от конечного стационарного состояния, функция ψ_u больше ψ_d , и обе они уменьшаются в ходе оогенеза [Зотина, Зотин, 1980]. Во время зародышевого развития и роста функция ψ_u лежит ниже ψ_d , причем $\psi_u \rightarrow 0$, а $\psi_d \rightarrow \psi_{st}$. Точка пересечения лежит где-то в конце оогенеза или на самых ранних стадиях зародышевого развития.

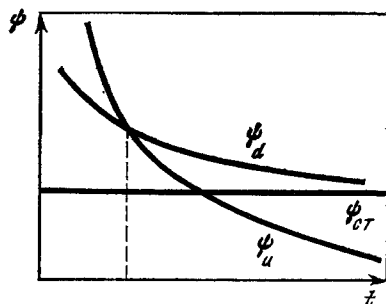


Рис. 47. Схематическое изображение изменений ψ_u - и ψ_d -функций в оогенезе животных [Зотина, Зотин, 1980]

Таким образом, опираясь на теорию флуктуаций Эйнштейна и некоторые термодинамические соображения, мы получили кинетические уравнения для диссипативной функции (17) и (22), функции внешней диссипации (20) и функции связанной диссипации (21), не опираясь на конкретное значение параметров, характеризующих развитие и рост организмов. Следовательно, эти уравнения могут быть использованы и для описания любых других систем, не слишком далеко уклонившихся от области применимости термодинамики линейных необратимых процессов. Так как специфические особенности живых систем не отражены в уравнениях (20) — (22), то значения констант, входящих в эти уравнения, можно определить из экспериментальных данных, полученных на совершенно иных физических моделях, и, во всяком случае, эти константы должны быть одинаковы для разных видов организмов.

КИНЕТИКА КОНСТИТУТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ: ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Возможен чисто феноменологический подход к построению уравнений, описывающих изменение интенсивности дыхания (диссипативной функции) во время развития и роста организмов. В отличие от стохастического подхода, в этом случае большое значе-

ние имеют специфические для процессов развития понятия и параметры.

Как уже говорилось, процессы развития, роста и старения организмов с феноменологической точки зрения складываются из трех видов явлений: роста, дифференцировки и формообразования. Соответственно (см. гл. II) были получены линейные и нелинейные феноменологические уравнения, учитывающие взаимодействие роста, дифференцировки и формообразования. Эти уравнения легко использовать для описания кинетики изменения диссипативной функции во время развития, опираясь на основные соотношения термодинамики неравновесных процессов.

Действительно, линейные феноменологические уравнения в термодинамике неравновесных процессов записываются в виде

$$I_i = \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j \quad (i = 1, \dots, n). \quad (23)$$

Диссипативная функция равна

$$\psi = \frac{T}{V} \frac{d_i S}{dt} = \sum_{j=1}^n \bar{I}_j X_j. \quad (24)$$

Подставляя (23) в (24), получаем

$$\dot{\psi} = \dot{\psi}_0 = \sum_{j=1}^n X_j \sum_{i=1}^n L_{ij} X_j \quad (i = 1, \dots, n). \quad (25)$$

Подставляя значение сил (см. гл. II) в уравнение (25), получаем

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_0 = & r_g \left[L_{gg} \left(\frac{W_m^b}{W^b} - 1 \right) + L_{gd} (t_m - t) + \right. \\ & + L_{gf} (W_m^b - W^b) \left. \right] \left(\frac{W_m^b}{W^b} - 1 \right) + r_d \left[L_{dg} \left(\frac{W_m^b}{W^b} - 1 \right) + \right. \\ & + L_{dd} (t_m - t) + L_{df} (W_m^b - W^b) \left. \right] (t_m - t) + r_f \times \\ & \times \left[L_{fg} \left(\frac{W_m^b}{W^b} - 1 \right) + L_{fd} (t_m - t) + L_{ff} (W_m^b - W^b) \right] (W_m^b - W^b), \end{aligned} \quad (26)$$

где r_g , r_d , r_f — константы размерности (другие обозначения см. гл. II).

В этом уравнении слишком много различных констант и параметров, и поэтому оно кажется бессодержательным, так как при соответствующем подборе коэффициентов может описать все, что угодно. Однако число подгоняемых коэффициентов можно значительно уменьшить, получая их из экспериментальных данных и уравнений, независимых от уравнения (26). В частности, константу b можно получить из экспериментальных данных о зависимости интенсивности дыхания от веса животных. Коэффициенты L_{gg} , L_{gd} , L_{gf} можно определить, используя линейное феноменологическое уравнение роста для описания экспериментальных

кривых роста животных (см. гл. II). Из соотношения взаимности Онзагера вытекает, что $L_{dg} = L_{gd}$, $L_{fg} = L_{gf}$ и $L_{fd} = L_{df}$. Остальные коэффициенты приходится получать путем подбора при описании с помощью уравнения (26) кривых изменения интенсивности дыхания в процессе развития или роста животных. В принципе константы размерности r_g , r_d и r_f должны быть одинаковыми для всех животных или хотя бы для группы родственных животных. Поэтому их можно будет получить при многократном использовании уравнения [26].

Для проверки возможности использования уравнения (26) в качестве феноменологического уравнения конститутивного процесса мы использовали данные об изменении интенсивности дыхания во время развития и роста насекомых, млекопитающих и птиц. В соответствии с изложенными выше соображениями сначала была определена константа b , затем все остальные константы.

На рис. 48 сопоставлены данные о интенсивности дыхания сверчков, тараканов, аксолотлей, кур и крыс с кривыми, рассчитанными по уравнению (26). Как видно из этих расчетов, уравнение (26) удовлетворительно описывает изменение дыхания в онтогенезе некоторых видов животных.

Сходным образом можно получить нелинейное феноменологическое уравнение конститутивных процессов. В этом случае следует использовать нелинейные феноменологические уравнения вида

$$\bar{I}_i = \sum_{j=1}^n L_{ij}(X) X_j \quad (i = 1, \dots, n) \quad (27)$$

и соответственно

$$\psi = \zeta_{O_2} = \sum_{j=1}^n X_j \sum_{i=1}^n L_{ij}(X) X_j. \quad (28)$$

Подставляя в уравнение (28) значение потоков и сил из нелинейных феноменологических уравнений (см. гл. II), получаем

$$\begin{aligned} \zeta_{O_2} = r_g a_1 \left[L_{gg} \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right) + a_2 L_{gd} (t_m - t) + \right. \\ \left. + a_3 L_{gf} (W_m^b - W^{b(t)}) \right] \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right) + r_d a_2 \left[a_1 L_{dg} \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right) + \right. \\ \left. + L_{dd} (t_m - t) + a_3 L_{df} (W_m^b - W^{b(t)}) \right] (t_m - t) + \\ \left. + r_f a_3 \left[a_1 L_{fg} \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right) + a_2 L_{fd} (t_m - t) + \right. \right. \\ \left. \left. + L_{ff} (W_m^b - W^{b(t)}) \right] \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right), \quad (29) \right. \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a_1 = \exp \left[-\alpha_g \left(\frac{W_m^b}{W^{b(t)}} - 1 \right)^2 \right], \quad a_2 = \exp [-\alpha_d (t_m - t)^2], \quad (30) \\ a_3 = \exp [-\alpha_f (W_m^b - W^{b(t)})], \quad b(t) = b [1 + \gamma t \exp (-\beta t)]. \end{aligned}$$

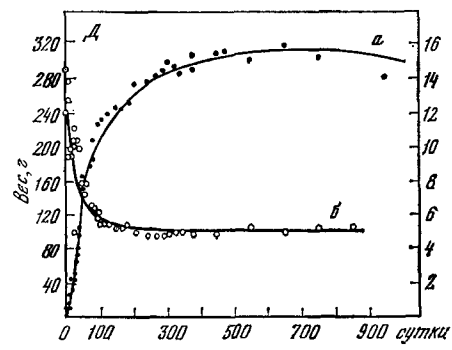
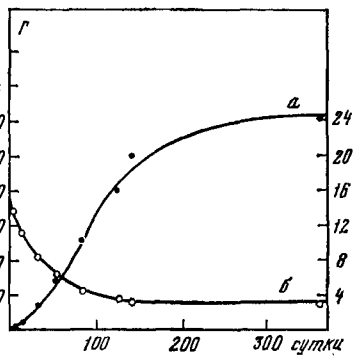
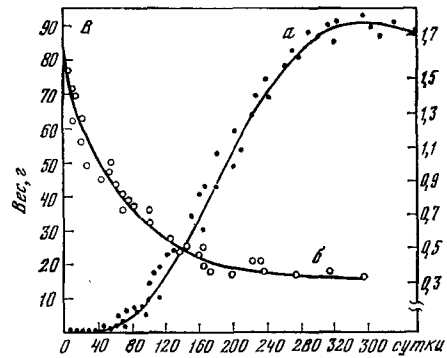
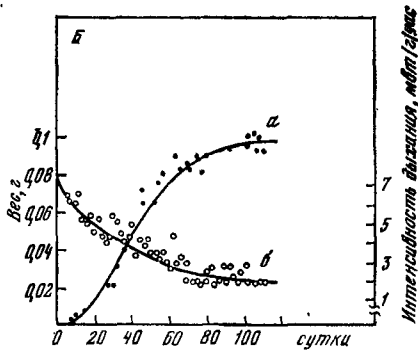
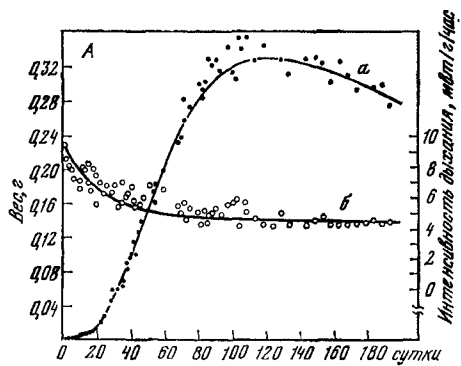


Рис. 48. Рост (а) и интенсивность дыхания (б)

А — сверчки [Никольская и др., 1982]; В — рыжие тараканы [Loehr et al., 1976]; В — аксолотли [Радзинская, Никольская, 1982]; Г — куры [Barott, Pringle, 1946]; Д — белые крысы [Kleiber, 1961]

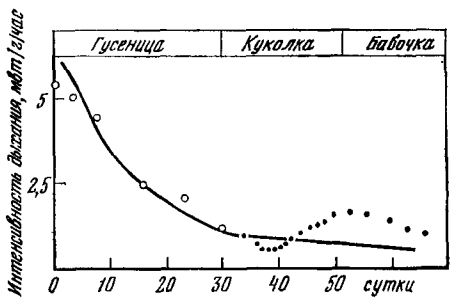


Рис. 49. Изменение интенсивности дыхания в онтогенезе тутового шелкопряда [Радзинская, Никольская, 1982]

Расчет кривой по уравнению (29)

В этом случае число произвольных коэффициентов не возрастает, так как все добавочные константы α_g , α_d , α_j , γ и β можно определить из нелинейного феноменологического уравнения роста в системе уравнений (23).

Мы провели проверку соответствия уравнения (29) экспериментальным данным на примере тутового шелкопряда. Как видно из рис. 49, уравнение (29) удовлетворительно описывает изменение интенсивности дыхания тутового шелкопряда.

Таким образом, феноменологические соотношения термодинамики неравновесных процессов могут быть использованы для получения уравнений, описывающих изменение основного обмена в процессе развития и роста организмов. Конечно, полученные феноменологические уравнения (26) и (29) слишком сложны для практического использования в биологии развития. Главный смысл их получения, так же как уравнений (17), (20)—(22), состоит в том, что они показывают принципиальную возможность использования термодинамики необратимых процессов для количественного описания роста, дифференцировки и формообразования, для описания конститутивных процессов.

ЭНЕРГЕТИКА И КРИТЕРИИ ОПТИМАЛЬНОСТИ ОНТОГЕНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

М. А. Ханин

Как известно, в процессе роста обнаруживаются потребности в энергии, а также в различных веществах, необходимых для формирования тканей. При решении многих задач, связанных с математическим моделированием онтогенеза, необходимо установить факторы, играющие определяющую роль в развитии процессов,— так называемые лимитирующие факторы.

Ниже рассматриваются энергетические и белковые потребности особи в онтогенезе с точки зрения ограничений, налагаемых возможностью удовлетворения этих потребностей. Далее предлагается критерий оптимальности онтогенетических параметров, являющихся функцией возраста. На основе критерия оптимальности, формализующего выживание в борьбе за существование, получено дифференциальное уравнение, решением которого является оптимальная в эволюционном смысле зависимость фенотипических параметров особи от возраста.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОТРЕБНОСТИ В ПРОЦЕССЕ РОСТА

Энергетические потребности особи в процессе индивидуального развития определяются следующими факторами [Ханин и др., 1978].