НЕЛИНЕЙНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

§ 8.1. ВВЕДЕНИЕ

Поведение динамической системы описывается физикой на языке детерминистической теории, пользующейся дифференциальными уравнениями.

Динамические системы линейны, если их кинетическое поведение может быть представлено линейными дифференциальными уравнениями, т. е. уравнениями, коэффициенты которых не зависят от координат и скоростей. Иными словами, предполагается, что параметры системы не зависят от ее состояния. Почти всегда такое предположение есть идеализация, однако для множества задач физики применение линейных уравнений и законно, и целесообразно. Как показано в гл. 2, в неравновесной термодинамике линейность означает прямую пропорциональность между реакцией системы (потоками) и действующей силой (обобщенные силы).

При невыполнении условия независимости параметров от состояния системы (в частности, постоянства феноменологических коэффициентов в неравновесной термодинамике) система оказывается нелинейной. Это — общий случай неидеализированной системы. Однако поведение нелинейной системы может трактоваться на основе линейных законов при малых отклонениях от состояния равновесия или стационарного состояния. Линеаризация уравнений есть обоснованный прием исследования соответствующих задач. Основные биологические явления вообще не могут быть поняты на основе «линейной теории». Мы уже встречались с существенно нелинейными процессами — с генерацией и распространением нервного импульса, с мышечным сокращением и т. д. В этой и следующей главе рассматриваются процессы, связанные с упорядоченным поведением биологической системы в пространстве и времени.

Остановимся прежде всего на термодинамическом аспекте проблемы. Как показано в работах Пригожина и его школы [1—3, 123], линейная термодинамика, ограничивающаяся рассмотрением состояний, близких к равновесию, не может объяснить возникновение упорядоченной системы при обычных (т. е. не очень низких) температурах. Имеются две возможности возникновения порядка. Первая возможность чисто термодинамическая. Система не адиабатична, она находится в контакте с тепловым резервуаром. Ее состояние характеризуется значением свободной энергии, которая минимальна в равновесии. Термодинамическое упорядочение связано с понижением энергии системы. Ему препятствует энтропийный вклад в свободную энергию. Однако при достаточно низкой температуре этот вклад становится настолько малым, что более не мешает упорядочению, и образуется равновесная упорядоченная система, скажем, кристалл.

Очевидно, что эта возможность не реализуется в сложных биологических системах. Вероятность возникновения термодинамической упорядоченности при физиологических температурах (в области 300 К) для системы, состоящей из макроскопического числа разнообразных молекул, исчезающе мала. При этих температурах должен превалировать термодииамический беспорядок.

Имеется, однако, вторая возможность упорядочения — создание порядка вдали от равновесия, кинетическое упорядочение, возникновение *диссипативной системы*. Когерентное поведение такого рода возможно вне области стабильности состояний, характеризуемых обычным термодинамическим поведением. Критерием возможности возникновения упорядоченной диссипативной структуры является невыполнение условия устойчивости. Приведем вновь основные соотношения неравновесной термодинамики (см. гл. 2). Функция диссипации равна

$$\sigma = \frac{d_i S}{dt} = \sum_j J_j X_j \geqslant 0. \tag{8.1}$$

Ее изменение во времени записывается в виде

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{d_J \sigma}{dt} + \frac{d_X \sigma}{dt} = \sum_j X_j \frac{dJ_j}{dt} + \sum_j J_j \frac{dX_j}{dt}. \tag{8.2}$$

При независимых от времени граничных условиях имеем

$$\frac{d_X \sigma}{dt} \leqslant 0. \tag{8.3}$$

Отсюда следует условие устойчивости рассматриваемого стационарного состояния

$$\sum_j \delta J_j \, \delta X_j \geqslant 0, \tag{8.4}$$

где δJ_j, δX_j — отклонения величин обобщенных потоков и сил от их стационарных значений. Вблизи равновесия условие

(8.4) всегда выполняется. Применительно к химическим процессам оно имеет вид

$$\sum_j \delta v_j \delta \mathscr{A}_j \geqslant 0. \tag{8.5}$$

Если условие (8.4) не выполняется, то стационарное состояние не устойчиво и возможно усиление флуктуаций, приводящих к возникновению нетермодинамического порядка. «Порядок через флуктуации» возможен, очевидно, лишь в такой открытой системе, поведение которой существенно нелинейно.

О каком порядке идет речь, к чему может приводить нелинейность поведения системы? Прежде всего это возникновение пространственного порядка, структуры, в пространственно гомогенной системе. Но нелинейности основных соотношений ответственны и за упорядоченное поведение во времени, в частности, за незатухающие колебания системы.

В биологии мы встречаемся с тремя группами явлений, непосредственно свидетельствующих о нелинейности соответствующих процессов.

Во-первых, это периодические, колебательные, явления. На всех уровнях организации (от макромолекулярного до популяционного) в биологических системах происходят незатухающие колебания характеристических физических параметров — ферментативной активности, концентрации метаболитов, численности популяции и т. д.

Во-вторых, поведение клеток и организмов на всех уровнях организации подлежит регуляции и контролю, определяемым кооперативными взаимодействиями, отсутствующими в линейных системах.

В-третьих, биологическая система, начиная с клетки и кончая биосферой в целом, необратимо развивается, эволюционирует. Развитие означает возникновение новых структур, т. е. процесс существенно нелинейный.

Остановимся, прежде всего, на колебательных процессах. Можно привести весьма общие аргументы в пользу того, что биологическая система должна быть колебательной [4]. Биологические системы являются результатом длительной эволюции. Устойчивые системы за время эволюции должны были уравновеситься, стать частью среды. Напротив, неустойчивые системы за это время распались. Следовательно, лишь системы, внутреннее движение которых имеет колебательную природу, могли сохраниться.

Конечно, это лишь качественное рассуждение, и научная аргументация требует анализа временно́го поведения системы. Но, так или иначе, колебательные процессы чрезвычайно важны в биологии. Гудвин предпринял попытку построить универсальную теорию внутриклеточных регуляторных процессов, исходя из рассмотрения клетки как системы химических осцилляторов [5]. Считая эти осцилляторы почти независимыми, Гудвин строит формальную статистическую механику такой системы, вводя по аналогии с обычными физическими величинами условные параметры — «таландическую температуру» и т. д. Обычные понятия термодинамики заменяются условными вследствие того, что в фазовом пространстве системы роль координат играют концентрации метаболитов, а роль скоростей — скорости реакций. Колебания возникают благодаря наличию обратных связей. Эта концепция не может быть принята. Как уже неоднократно отмечалось выше, биологическая система не является статистической, но представляет собой «химическую машину». Введение статистики по Гудвину не меняет дела, так как статистическое рассмотрение возможно лишь для большого числа независимых химических осцилляторов, для «газа», состоящего из таких осцилляторов. Но в действительности клетка есть не «газ», но «машина», и колебательные химические процессы в клетке взаимосвязаны и пространственно организованны. С другой стороны, гораздо более строгий и общий подход к рассмотрению биологических систем основывается на неравновесной термодинамике, пользующейся обычными физическими понятиями. Убедительная критика теории Гудвиа дана Молчановым [6].

Из термодинамического рассмотрения открытых систем, находящихся вдали от равновесия, следует необходимость изучения их стационарных состояний, которые могут быть множественными [7]. Необходимо исследовать устойчивость этих состояний и условия переходов между ними.

В сущности, термодинамика здесь кончается, и научная трактовка нелинейных процессов состоит в их рассмотрении, основанном не на общих термодинамических свойствах систем, но на конкретных кинетических моделях, изучаемых посредством аппарата дифференциальных уравнений. Вопрос о его применимости для биологических систем не тривиален.

«Химическая машина», вообще говоря, характеризуется не непрерывным, но дискретным набором состояний. Применение аппарата дифференциальных уравнений к такой системе означает включение дискретных состояний в некоторое непрерывное множество. Такая процедура не препятствует трактовке поведения дискретной системы, напротив, она позволяет при надлежащем выборе модели его проанализировать (см. [4]). Вместе с тем аппарат дифференциальных уравнений может оказаться недостаточным для исследования стохастических процессов, требующих применения теории вероятностей, теории цепей Маркова. Вопрос о математическом методе должен решаться отдельно для каждого класса моделей. Само моделирование определяется не столько объектом исследования, сколько изучаемым процессом, и непосредственно зависит от шкалы времени, в которой этот процесс развивается. В любой биологической системе происходит множество нелинейных кинетических процессов, характеризуемых собственными временами.

В этой и следующей главах приведено модельное рассмотрение характерных для биологии колебательных, регуляторных и эволюционных процессов. Основным методом является исследование кинетических уравнений, описывающих модель, но в ряде случаев такое исследование должно быть дополнено решением соответствующих стохастических задач.

Общее рассмотрение этих проблем дано также в монографии Романовского, Степановой, Чернавского [18].

§ 8.2. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КИНЕТИКИ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ

Определим метод изучения биологической системы как построение кинетической модели и описание модели дифференциальными уравнениями, т. е. как построение математической модели и исследование решений этих уравнений.

Достаточно общая форма математической модели имеет вид

$$\left.\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= F_1(x_1, \ldots, x_N), \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \frac{dx_N}{dt} &= F_N(x_1, \ldots, x_N), \end{aligned}\right\} \tag{8.6}$$

где $x_1, \ldots, x_N$ — физические переменные, характеризующие систему и зависящие от времени и начальных условий, $F_1, \ldots$ $\ldots, F_N$ — в общем случае нелинейные функции от этих переменных.

Систему (8.6) можно линеаризовать. Ищутся стационарные значения переменных $x_1^0, \ldots, x_N^0$, являющиеся решениями уравнений (8.6) при $\dot{x}_1 = \ldots = \dot{x}_N = 0$. Далее исследуются линейные уравнения, записанные в переменных, представляющих собой малые отклонения $\alpha_1 = x_1 - x_1^0, \ldots, \alpha_N = x_N - x_N^0$; членами, нелинейными относительно α_i, можно пренебречь. В большинстве случаев для интересующих нас задач оказывается возможным ограничиться системами второго порядка ($N = 2$) (см. [18]).

В соответствии со сказанным целесообразно начать изложение с исследования простой линейной модели — осциллятора