

ОБЗОРЫ И ЛЕКЦИИ

УДК 517Ю925:517.928.2:517.928.4:574.4

УПРОЩЕНИЕ МОДЕЛИ ЭКОСИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ХАРАКТЕРНЫХ СКОРОСТЕЙ ПРОЦЕССОВ

Глаголев М.В.^{1,2,3)}, Лапина Л.Э.⁴⁾

¹⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²⁾Югорский государственный университет (г. Ханты-Мансийск)

³⁾Институт лесоведения РАН (пос. Успенское, Московская обл.)

⁴⁾Отдел математики Коми Научного Центра УрО РАН (г. Сыктывкар)

m_glagolev@mail.ru

Данная работа представляет собой адаптированную к формату журнальной статьи лекцию курса «Математическое моделирование биологических процессов», читаемого одним из авторов. В ней дается краткое напоминание об основных методах упрощения математической модели экосистемы. Более подробно рассматривается один из этих методов – анализ характерных масштабов отдельных переменных модели (в динамических моделях – характерных времен или скоростей) и ее упрощение при помощи теоремы Тихонова на основе этого анализа. Данный метод изложен на примере упрощения модели динамики органического вещества почвы. Приводятся оценки количества операций для решения некоторых типичных классов задач биологической кинетики и математической экологии, на основании которых показана существенная польза от применения метода упрощения задач даже в современных условиях бурного развития численных методов и компьютерной техники.

Ключевые слова: Метод квазистационарных концентраций, теорема Тихонова, уравнения с малым параметром, модель МакКендрика-Пая, уравнение Ферхюльста-Пирла.

Цитирование: Глаголев М.В., Лапина Л.Э. 2012. Упрощение модели экосистемы на основе анализа характерных скоростей процессов // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 3. № 3. С. 3–30.

«Если вы не сделаете своей целью простоту, то уподобитесь женщинам и станете легкомысленными, приобретете пристрастие к... экстравагантности; в итоге вы станете эгоистами и подлецами и дойдете до последней степени низости...»

Император МЭЙДЗИ: 5-ая заповедь «Императорского рескрипта...» 1882 г. (цит. по [Бенедикт, 2007, с. 252])

ВВЕДЕНИЕ

Изучение упрощенных постановок задачи

Степень подробности моделирования изучаемых явлений зависит от цели моделирования. Однако в любом случае задача моделирования заключается в том, чтобы построить модель явления, содержащую возможно меньшее число переменных и произвольных параметров, и в то же время правильно отражающую свойства явления [Ризниченко, 2002, с. 94]. Конечно, для ряда случаев адекватность достигается лишь при использовании достаточно сложных моделей, но и здесь упрощение (например, рассмотрение предельных случаев) может оказаться полезным.

Дело в том, что, к сожалению, для многих имеющих практическую ценность задач, их строгое исследование в полной постановке провести не удастся, и к решению приступают без детального анализа математических свойств этих задач. Это нежелательная, но вынужденная мера, так как в прикладных исследованиях существенное значение имеют конкретные (часто – весьма сжатые) сроки получения результата. На этом этапе полезным оказывается изучение упрощенных постановок задачи. Иногда для них удается провести исследование, позволяющее понять основные особенности исходной вычислительной задачи. Особую ценность имеют различные аналитические решения; они оказываются полезными не только для анализа явления, но и как основа для тестовых испытаний на этапе отладки программы [Амосов и др., 1994, с. 17].

Ю.М. Романовский с соавт. [1975, с. 30] под упрощением математической модели понимают уменьшение числа уравнений и вместе с этим числа параметров, определяющих поведение системы. Однако очевидно, что уменьшения числа параметров (при том же числе уравнений) уже достаточно для того, чтобы система считалась более простой.

Рассмотрим, например, модель МакКендрика-Пая с отмиранием:

$$\begin{cases} dX/dt = \alpha \cdot s \cdot X - m \cdot X \\ ds/dt = -\alpha \cdot s \cdot X/Y, \end{cases}$$

где X и s – концентрации, соответственно, микроорганизмов и питательного субстрата для их роста; α – коэффициент, определяющий скорость роста; Y – «экономический коэффициент» (или «выход биомассы»), представляющий собой отношение прироста биомассы (произошедшее в течение бесконечно малого промежутка времени) к убыли субстрата, потребленного этой биомассой (за тот же промежуток времени) при отсутствии отмирания; m – удельная скорость отмирания. Проинтегрировать эти уравнения аналитически (т.е. найти в явном виде концентрации X и s как функции времени t) невозможно. Однако если отмирания нет, т.е. если $m = 0$, то мы имеем обычную модель МакКендрика-Пая, являющуюся столь простой, что ее аналитическое интегрирование осуществляется без каких-либо затруднений (см. Приложения 1 и 3).

Но кроме указанного выше «количественного» упрощения, связанного с уменьшением числа уравнений или параметров, безусловно существует и принципиально иное («качественное») упрощение, например, приближение нелинейных членов линейными в окрестности некоторой точки. Такое упрощение очень часто применяется при анализе свойств математических моделей, в частности, на нем основан хорошо известный анализ качественной структуры равновесия динамических систем – см., например, [Младов, 1966; Романовский и др., 1975, с. 25-30; Смагин и др., 2001, с. 15-19; Ризниченко, 2011, с. 85-118].

Весьма глубокий подход к способам упрощения математических моделей изложен в [Самарский и Михайлов, 1997, с. 202-269]. Одно из фундаментальных свойств природных, технологических, многих экономических и социальных объектов – симметрия (подобие, повторяемость, воспроизводимость) – находит свое отражение в их математических моделях. Наличие какого-либо вида симметрии у изучаемого явления означает большую простоту объекта в сравнении с его менее симметричным аналогом. На этом основываются некоторые широко применяемые методы упрощения математических моделей и, следовательно, методы упрощения их анализа. Они состоят в понижении порядка системы уравнений, образующих модель, в уменьшении числа переменных, от которых зависят искомые величины, или числа постоянных параметров, определяющих процесс, и т.д. [Самарский и Михайлов, 1997, с. 202]. Например, если мы хотим описать диффузию газа внутри почвенной частицы, то в общем случае придется вводить трехмерное поле концентрации газа, т.е. использовать зависимость величины концентрации от трех пространственных координат (т.к. реальная почвенная частица может иметь довольно сложную форму). Но если рассмотреть сферически симметричную частицу, то вместо трехмерного поля становится достаточно лишь одномерного профиля – концентрация газа в любой точке внутри сферически симметричной¹ «почвенной частицы» будет зависеть от единственной пространственной координаты (от расстояния между данной точкой и центром сферы).

Наконец, существует весьма формальный подход к упрощению моделей (применимый, правда, не во всех случаях), основанный на исследовании так называемых коэффициентов чувствительности зависимых переменных модели от ее параметров. В данной работе мы не будем его рассматривать, а посвятим теории чувствительности отдельную публикацию.

Используемые сокращения

MePyK – методы Рунге-Кутты;

ОЗ – обратные задачи;

¹ Казалось бы, вместо «сферически симметричной» мы могли написать просто «сферической» почвенной частицы. Однако, используя более общее понятие, мы подчеркиваем, что речь идет не только о геометрической симметрии. Для того, чтобы концентрация определялась лишь одной пространственной координатой, важна не только сферическая форма частицы, но и сферически симметричное распределение источников/стоков (которыми могут быть, например, микроорганизмы) внутри частицы.

ПО – программное обеспечение;

ПряЗ – прямые задачи.

АНАЛИЗ ХАРАКТЕРНЫХ СКОРОСТЕЙ ПРОЦЕССОВ

Пример: динамика органического вещества почвы

Биологические системы включают большое число процессов с разными характерными временами, причем иерархия этих времен такова, что они различаются на порядки [Ризниченко, 2002, с. 93].

В качестве примера рассмотрим модель динамики почвенного углерода из [Van der Linden et al., 1987]²:

$$dX_1/dt = -k_1 \cdot X_1 + \alpha \cdot (L + k_4 \cdot X_4),$$

$$dX_2/dt = -k_{23} \cdot X_2 - k_{24} \cdot X_2 + (1 - \alpha) \cdot (L + k_4 \cdot X_4),$$

$$dX_3/dt = k_{23} \cdot X_2 - k_3 \cdot X_3,$$

$$dX_4/dt = Y_1 \cdot k_1 \cdot X_1 + Y_{24} \cdot k_{24} \cdot X_2 + Y_3 \cdot k_3 \cdot X_3 - k_4 \cdot X_4,$$

$$d[CO_2]/dt = (1 - Y_1) \cdot k_1 \cdot X_1 + (1 - Y_{24}) \cdot k_{24} \cdot X_2 + (1 - Y_3) \cdot k_3 \cdot X_3,$$

где

X_1 (тС·га⁻¹) – масса³ легкоразлагающихся органических веществ, таких как белки и углеводы (и мономеры, и полимеры); заметим, что здесь и далее масса органики выражена через массу только углерода, всегда входящего в состав органического вещества;

X_2 (тС·га⁻¹) – масса более трудноразложимых органических веществ;

X_3 (тС·га⁻¹) – масса «старого» органического вещества, наиболее устойчивого к разложению;

X_4 (тС·га⁻¹) – масса микробов, осуществляющих реакции разложения перечисленных выше веществ;

$[CO_2]$ (тС·га⁻¹) – масса углекислого газа, выделившегося в этих процессах разложения;

$k_1 = 16 \text{ год}^{-1}$ – константа скорости превращения (по кинетике первого порядка) легкоразлагающихся органических веществ в микробную биомассу и CO_2 ;

$k_{23} = 0.2 \text{ год}^{-1}$ – константа скорости превращения (по кинетике первого порядка) трудноразложимых веществ в «старое» органическое вещество;

$k_{24} = 0.16 \text{ год}^{-1}$ – константа скорости превращения (по кинетике первого порядка) трудноразложимых органических веществ в микробную биомассу и CO_2 ;

$k_3 = 0.025 \text{ год}^{-1}$ – константа скорости превращения (по кинетике первого порядка) «старого» органического вещества в микробную биомассу и CO_2 ;

$k_4 = 4 \text{ год}^{-1}$ – константа скорости распада (по кинетике 1-го порядка) микробной биомассы до легкоразлагающихся и трудноразлагающихся органических веществ;

$Y_1 = 0.4$ – доля углерода, идущая на синтез микробной биомассы при ее росте на легкоразлагающихся органических веществах (соответственно доля углерода, идущая при этом в CO_2 , составляет $1 - Y_1$);

$Y_{24} = 0.3$ – доля углерода, идущая на синтез микробной биомассы при ее росте на трудноразложимых органических веществах (соответственно доля углерода, идущая при этом в CO_2 , составляет $1 - Y_{24}$);

² В отечественной литературе краткое описание этой модели и ее численного решения можно найти в [Смагин и др., 2001: с. 57-59]. Подчеркнем, что здесь мы рассматриваем ее лишь для простой иллюстрации идеи систем с разными характерными временами отдельных процессов. По своему «биологическому наполнению» эта модель (вполне соответствовавшая уровню 30-летней давности, когда она создавалась – ср., например, с [Бондаренко и др., 1981]) сегодня уже вряд ли может удовлетворить взыскательного модельера. Например, в ней принята линейная кинетика потребления микробами легкоразлагающихся органических веществ в почве, в то время как уже давно стало ясно, что кинетика эта должна соответствовать, по крайней мере, нелинейному уравнению Михаэлиса-Ментен (см., например, [Гончар-Зайкин и др., 1981; Panikov et al., 1992]), а на больших временах следует учитывать и автокаталитическое размножение самих микроорганизмов-редуцентов, т.е. нелинейные уравнения собственно микробиологической кинетики [Grant and Long, 1985; Сысуев, 1986, с. 126-128; Паников, 1992].

³ Как видно из размерности (тС·га⁻¹), это не совсем масса (не просто т углерода), а, скорее, некоторый аналог концентрации. По физическому смыслу это и есть концентрация, ведь X_1 – это масса легкоразлагающейся органики в объеме почвы под 1 гектаром земной поверхности. Это же замечание относится и к остальным переменным данной модели.

$Y_3 = 0.2$ – доля углерода, идущая на синтез микробной биомассы при ее росте на «старом» органическом веществе (соответственно доля углерода, идущая при этом в CO_2 , составляет $1 - Y_3$);
 L ($\text{тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}$) – скорость поступления органических веществ в почву;
 α ($\alpha = 0.15$) – доля фракции легкоразлагающихся веществ в распадающейся микробной биомассе и в органическом веществе, поступающем в почву (соответственно, доля фракции трудноразложимых веществ составляет $1 - \alpha$).

В связи с особой важностью круговорота углерода в природе, модель динамики органического вещества имеет значение не только для расчета тех переменных, которые непосредственно входят в эту конкретную модель, но и для многих других, которые в природе оказываются связаны с ними. В качестве важного примера можно привести проблему эмиссии почвой такого парникового газа, как метан. Выполняется множество измерений эмиссии в самых разных природных зонах (см., например, [Mosier et al., 1996; Butterbach-Bahl et al., 2004; Глаголев и Клепцова, 2009; Sabrekov et al., 2011]). Но понятно, что покрыть полевыми измерениями всю поверхность Земли пока невозможно. Очевидным методом научно-обоснованной оценки эмиссии метана в региональном и даже глобальном масштабах является математическое моделирование (причем данные полевых измерений используются для валидации и верификации моделей). Поскольку образование метана по биологическому смыслу зависит от поступления в анаэробную метаногенную систему органического вещества, то собственно «метановая» модель неизбежно оказывается сопряжена с обычными моделями углеродного цикла (в которые изначально CH_4 не входит). И действительно, например, в модели MEM⁴ Cao et al. [1995], в качестве отдельного блока (в котором рассчитывается количество почвенной органики, идущее на синтез CH_4) используется как раз вышеописанная модель Van der Linden et al. [1987]. А в ряде других моделей эмиссии метана (например, [Cao et al., 1995; Glagolev, 1999; Cai et al., 2003]) используются модели динамики органического вещества, сходные с ней.

Но вернемся к исследованию модели Van der Linden et al. [1987]. Пусть $L = 1.8 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}$ [Смагин и др., 2001: с. 58], начальные условия таковы: $X_1(0) = 0.984 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1}$, $X_2(0) = 12.938 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1}$, $X_3(0) = 10.148 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1}$, $X_4(0) = 0.787 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1}$ [Van der Linden et al., 1987], а для углекислого газа, очевидно, следует принять нулевое начальное условие. Подставляя все численные значения в модель, получаем скорости ($\text{тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}$) в начальный момент времени:

$$dX_1/dt \Big|_{t=0} = -k_1 \cdot X_1(0) + \alpha \cdot [L + k_4 \cdot X_4(0)] = -16 \cdot 0.984 + 0.15 \cdot (1.8 + 4 \cdot 0.787) \approx -15.0 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1},$$

$$dX_2/dt \Big|_{t=0} \approx -0.5 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}, \quad dX_3/dt \Big|_{t=0} \approx 2.3 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}, \quad dX_4/dt \Big|_{t=0} \approx 3.8 \text{ тС} \cdot \text{га}^{-1} \cdot \text{год}^{-1}.$$

Скорости различаются на два порядка! Причем, как и следовало ожидать, с максимальной (по абсолютному значению) скоростью идет процесс распада легкоразлагающихся органических веществ, а с минимальной – распад трудноразложимых веществ.

Теорема Тихонова является строгой математической формулировкой метода квазистационарных приближений⁵ в химической и ферментативной кинетике (см., например, [Романовский и др., 1975, с. 31; Эмануэль и Кнорре, 1984, с. 283; Ризниченко, 2011, с. 123-124; Глаголев и Фастовец, 2012]). Нормирование уравнений, а именно введение характерных величин той же размерности, что и изучаемые переменные и введение новых безразмерных нормированных величин, позволяет выделить уравнения с так называемым малым параметром при производной⁶. В этих уравнениях решение достаточно быстро достигает стационарного состояния.

⁴ Предназначенной для расчета эмиссии метана из рисовников.

⁵ Метод введен в химическую кинетику Боденштейном, поэтому иногда его называют *методом Боденштейна*, но обычно – методом квазистационарных концентраций (при этом важно отметить, что химики различают здесь понятия квазиравновесного и квазистационарного приближения) [Эмануэль и Кнорре, 1984, с. 280-283]. Иногда этот метод называют методом стационарных концентраций [Романовский и др., 1975: с. 31], что, с одной стороны, кажется наименее правильным (из всех вышеприведенных названий), поскольку, с формальной точки зрения, концентрации, все-таки, не являются строго стационарными, а немного меняются с течением времени, хотя и весьма близко от стационарного состояния. Но, с другой стороны, суть метода состоит именно в том, что эти (в реальности – квазистационарные) концентрации заменяются на строго стационарные. Так что, видимо, одинаково правильными можно считать все вышеприведенные названия метода.

⁶ Существует еще один полезный аспект этого нормирования, который мы за неимением места не сможем рассмотреть подробно, а лишь упомянем: такая процедура, например, для уравнений Навье-Стокса, позволяет выделить критерии подобия, по которым делаются выводы о подобии лабораторных и натуральных исследований.

Теорема Тихонова позволяет заменить эти дифференциальные уравнения алгебраическими, что существенным образом упрощает решение систем дифференциальных уравнений [Варфоломеев и Гуревич, 1999: с. 707].

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений [Варфоломеев и Гуревич, 1999: с. 707]:

$$dx_i/dt = f(x_1, \dots, x_n), \quad i = 1, \dots, n.$$

Пусть нам удалось после ряда преобразований и выбора соответствующих масштабов представить эту систему в виде

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \cdot dx_i/dt = F_i(x_1, \dots, x_n), & i = 1, \dots, l; \\ \varepsilon \cdot dx_j/dt = F_j(x_1, \dots, x_n), & j = l + 1, \dots, l + m; \\ dx_k/dt = F_k(x_1, \dots, x_n), & k = l + m + 1, \dots, n, \end{cases}$$

т.е. расположить ее по степеням малого параметра ε при производной⁷. Легко заметить, что коэффициенты ε и ε^2 фактически определяют скорости изменения концентраций x . В самом деле, эту систему можно представить также в виде

$$dx_i/dt = F_i/T_{min}, \quad dx_j/dt = F_j/T_{mid}, \quad dx_k/dt = F_k/T_{max},$$

где $T_{min} = \varepsilon^2$, $T_{mid} = \varepsilon$, $T_{max} = 1$. Если мы интересуемся поведением всех переменных как на малых отрезках времени порядка ε^2 , так и на временах порядка единицы, то нам необходимо исследовать полную систему. Если же нас интересуют явления, происходящие на средних временах $T_{mid} \sim \varepsilon$, то уравнения с постоянной времени ε^2 будут описывать очень быстрые процессы, а уравнения с постоянной времени T_{max} (порядка единицы), наоборот, – очень медленные по сравнению с временем T_{mid} процессы. Относительно последних можно сказать, что за время T_{mid} начальные значения концентраций x_k не успевают заметно измениться, т.е. в оставшихся уравнениях эти медленные переменные можно заменить постоянными (начальными) значениями [Романовский и др., 1975: с. 30–31]. А быстрые переменные, описываемые уравнениями с постоянной времени ε^2 , практически сразу же⁸ достигнут своих стационарных значений, т.е. в оставшихся уравнениях эти быстрые переменные можно заменить постоянными (стационарными) значениями. Таким образом, вместо исходной системы, содержащей n дифференциальных уравнений (l уравнений для быстрых переменных, m – для «средних» переменных и $n-l-m$ – для медленных переменных) мы будем иметь лишь m уравнений.

Обезразмеривание можно производить различными способами. Очевидно, что для обезразмеривания некоторой (имеющей размерность) переменной X можно разделить ее на некоторое характерное значение данной переменной. Часто вводят безразмерную переменную x , деля X на начальное значение, т.е. на $X(0)$. Однако такой способ не является универсальным, поскольку его нельзя применить для переменных, начальные значения которых – нулевые. В модели динамики почвенного углерода нулевое начальное значение имеет масса образовавшегося CO_2 . К счастью, размерность переменной $[\text{CO}_2]$ такая же, как любого X_i . Итак, мы введем следующие безразмерные переменные:

$$x_1 = X_1/X_1(0); \quad x_2 = X_2/X_2(0); \quad x_3 = X_3/X_3(0); \quad x_4 = X_4/X_4(0); \quad x_5 = [\text{CO}_2]/X_2(0).$$

Особо следует остановиться на обезразмеривании независимой переменной – времени.

Поскольку в рассматриваемой модели динамики органического вещества почвы присутствуют пять констант скорости, то, соответственно, имеем пять характерных времен, которые естественным образом разделяются на три группы – меньше года, годы (несколько лет) и десятки лет:

⁷ Если в исходной системе можно выделить уравнения с множителями ε^{n_1} , ε^{n_2} , etc. и при этом $n_1 > n_2 > \dots > 2$, то процесс редукции надо выполнять последовательно [Романовский и др., 1975: с. 30].

⁸ Словосочетание «сразу же» имеет смысл относительно интересующих нас времен порядка T_{mid} .

$$T_1 = 1/k_1 = 0.0625 \text{ года}; \quad T_4 = 1/k_4 = 0.25 \text{ года};$$

$$T_{23} = 1/k_{23} = 5 \text{ лет}; \quad T_{24} = 1/k_{24} = 6.25 \text{ года};$$

$$T_3 = 1/k_3 = 40 \text{ лет}.$$

Если нас интересуют процессы на средних временах, т.е. временах порядка нескольких лет, то в качестве характерного времени можно выбрать T_{24} (или T_{23}). Тогда «безразмерное время» (безразмерная независимая переменная τ) вводится по формуле

$$\tau = t/T_{24} = t \cdot k_{24}.$$

Следовательно, мы должны осуществить в уравнениях следующие замены:

$$X_1 = X_1(0) \cdot x_1; \quad X_2 = X_2(0) \cdot x_2; \quad X_3 = X_3(0) \cdot x_3; \quad X_4 = X_4(0) \cdot x_4; \quad [\text{CO}_2] = X_2(0) \cdot x_5; \quad t = \tau/k_{24}.$$

Такие подстановки дают:

$$dx_1/d\tau = -(k_1/k_{24}) \cdot x_1 + \alpha \cdot L/[X_1(0) \cdot k_{24}] + \{\alpha \cdot k_4 \cdot X_4(0)/[X_1(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_4,$$

$$dx_2/d\tau = -(k_{23}/k_{24} + 1) \cdot x_2 + (1 - \alpha) \cdot L/[X_2(0) \cdot k_{24}] + \{(1 - \alpha) \cdot k_4 \cdot X_4(0)/[X_2(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_4,$$

$$dx_3/d\tau = \{k_{23} \cdot X_2(0)/[X_3(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_2 - (k_3/k_{24}) \cdot x_3,$$

$$dx_4/d\tau = \{Y_1 \cdot k_1 \cdot X_1(0)/[X_4(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_1 + [Y_{24} \cdot X_2(0)/X_4(0)] \cdot x_2 + \{Y_3 \cdot k_3 \cdot X_3(0)/[X_4(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_3 - (k_4/k_{24}) \cdot x_4,$$

$$dx_5/d\tau = \{(1 - Y_1) \cdot X_1(0) \cdot k_1/[X_2(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_1 + (1 - Y_{24}) \cdot x_2 + \{(1 - Y_3) \cdot k_3 \cdot X_3(0)/[X_2(0) \cdot k_{24}]\} \cdot x_3,$$

Подставив численные значения, замечаем, что множители имеют существенно разную величину:

$$dx_1/d\tau = -100 \cdot x_1 + 1.7149 + 2.9992 \cdot x_4,$$

$$dx_2/d\tau = -2.25 \cdot x_2 + 0.7391 + 1.2926 \cdot x_4,$$

$$dx_3/d\tau = 1.5937 \cdot x_2 - 0.1563 \cdot x_3,$$

$$dx_4/d\tau = 50.0127 \cdot x_1 + 4.9319 \cdot x_2 + 0.403 \cdot x_3 - 25 \cdot x_4,$$

$$dx_5/d\tau = 4.5633 \cdot x_1 + 0.7 \cdot x_2 + 0.098 \cdot x_3,$$

из-за чего и правые части разных уравнений будут сильно различаться по абсолютной величине. Правая часть третьего уравнения имеет значение около 1. Второго уравнения – несколько меньше (по абсолютному значению). А правые части первого и четвертого уравнений по абсолютным значениям существенно больше. Но мы можем и правые части других уравнений также сделать приблизительно единичными за счет домножения правой и левой частей на множитель, обратный наибольшему (по абсолютному значению) коэффициенту правой части соответствующего уравнения:

$$0.01 \cdot dx_1/d\tau = -x_1 + 0.017149 + 0.029992 \cdot x_4,$$

$$dx_2/d\tau = -2.25 \cdot x_2 + 0.7391 + 1.2926 \cdot x_4,$$

$$dx_3/d\tau = 1.5937 \cdot x_2 - 0.1563 \cdot x_3,$$

$$0.02 \cdot dx_4/d\tau = x_1 + 0.0986 \cdot x_2 + 0.0081 \cdot x_3 - 0.4999 \cdot x_4,$$

$$0.2191 \cdot dx_5/d\tau = x_1 + 0.1534 \cdot x_2 + 0.0215 \cdot x_3,$$

Теперь все правые части – величины примерно одного порядка. Очевидно, что первое и четвертое уравнения описывают быстрые процессы. Заметим, что на пятое уравнение не стоит обращать особое внимание. Оно некоторым образом очень существенно отличается от всех остальных уравнений. Поскольку правые части первых четырех уравнений имеют как положительные, так и отрицательные слагаемые, то быстрые процессы приведут к установлению стационарного состояния. Например, рассмотрим первое уравнение. Начальная концентрация $x_1(0) = 1$ очень быстро начнет падать, но падать она будет не до нуля, а до такого стационарного значения x_{S1} , при котором будет выполняться равенство

$$x_{S1} = 0.017149 + 0.029992 \cdot x_4.$$

Поскольку это стационарное состояние достигается быстро (по сравнению с переменными x_2 и x_3), то мы можем использовать данную простую (алгебраическую) связь, а не решать дифференциальное уравнение для x_1 . Но правая часть пятого уравнения содержит только положительные члены, следовательно, x_5 может лишь возрастать и стационарное состояние для этой переменной никогда не достигается!

Итак, мы выразили из условия стационарности для первого дифференциального уравнения x_{S1} и теперь, считая $x_1 \approx x_{S1}$, отбросим это дифференциальное уравнение, а также избавимся от x_1 во всех оставшихся уравнениях:

$$dx_2/d\tau = 0.7391 - 2.25 \cdot x_2 + 1.2926 \cdot x_4,$$

$$dx_3/d\tau = 1.5937 \cdot x_2 - 0.1563 \cdot x_3,$$

$$0.02 \cdot dx_4/d\tau = 0.017149 + 0.0986 \cdot x_2 + 0.0081 \cdot x_3 - 0.4699 \cdot x_4,$$

$$0.2191 \cdot dx_5/d\tau = 0.017149 + 0.1534 \cdot x_2 + 0.0215 \cdot x_3 + 0.029992 \cdot x_4,$$

В результате, вместо пяти имеем только четыре дифференциальных уравнения, причем совместно необходимо решить лишь три первых из них, т.е. фактически мы имеем систему из трех уравнений. Чтобы наглядно убедиться в применимости описанного приема, проинтегрируем численно исходную и редуцированную системы и сравним результаты. Графики численного решения для полной системы приведены на рис. 1 (они получены при помощи MATLAB-функции, приведенной в Приложении 2).

Имея значения всех переменных в динамике для полной модели, интересно проверить выполнимость полученной нами выше (путем приравнивания нулю производной в первом дифференциальном уравнении) линейной квазистационарной алгебраической связи $x_{S1} = x_{S1}(x_4)$ – рис. 2. Из рис. 2 видно, что в полной модели переменная x_1 связана с x_4 гораздо более сложной (нежели линейная) зависимостью. Причем, если посмотреть на величины x_1 , то можно заметить, что нелинейность имеет место в диапазоне примерно от $x_1 = 0.05$ до $x_1 = 1$. Учитывая, что $0 < x_1 \leq 1$, получается, что линейное приближение можно использовать только на небольшом отрезке, составляющем лишь 5% от всей области значений x_1 . Но! Взглянем опять на рис. 1. Ведь, как мы уже установили из аналитического рассмотрения полной системы дифференциальных уравнений, переменная x_1 – быстрая. Теперь из рис. 1 видим, что, действительно, она пробегает вышеуказанный 95%-ный интервал очень быстро и примерно к моменту «безразмерного времени» $\tau = 0.05$ падает до $x_1 = 0.05$. Т.е., в основном, при интересующих нас значениях τ (порядка десятых и единиц) как раз выполняется условие $x_1 < 0.05$, следовательно, первое дифференциальное уравнение тут можно заменить простой линейной связью $x_{S1} = x_{S1}(x_4)$. Сравнение результатов интегрирования полной и редуцированной систем приведено на рис. 3. Из этого рисунка видно, что динамика переменных x_2 , x_3 , x_4 (количественно!) почти совсем не различается для полной и редуцированной моделей. Небольшое отклонение редуцированной модели от полной заметно для переменной x_5 . И, конечно, существенное расхождение между полной и редуцированной моделями, как мы уже обсуждали выше (чисто теоретически! а теперь видим это воочию), наблюдается на начальном участке для переменной x_1 , что немудрено, поскольку в редуцированной модели вообще отсутствует дифференциальное уравнение для x_1 , вместо которого используется квазистационарная линейная связь x_1 с x_4 .

Итак, следует признать, что редукция (за счет выделения быстрых и медленных переменных) пяти дифференциальных уравнений к четырем дала вполне хороший количественный результат всюду, за исключением небольшого начального участка интервала интегрирования.

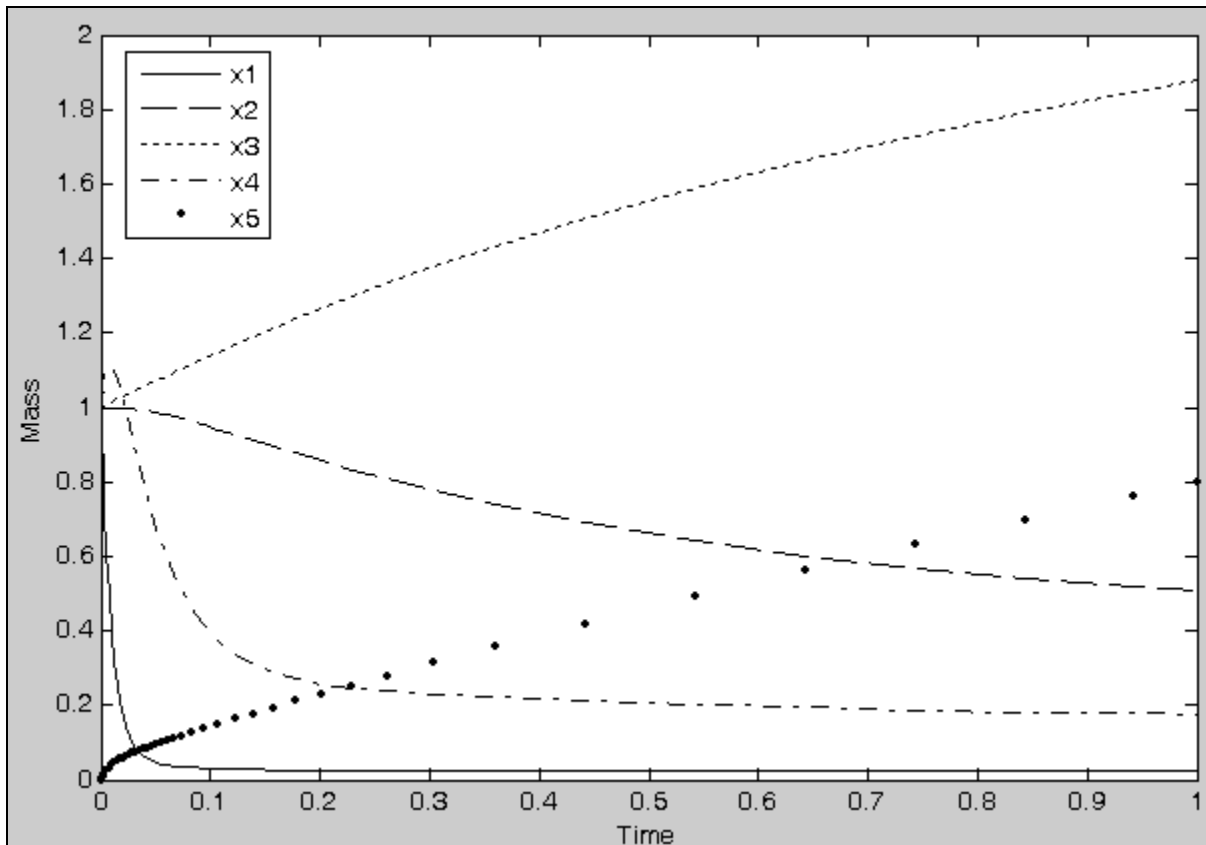


Рис. 1. Динамика полной модели Van der Linden et al. [1987].

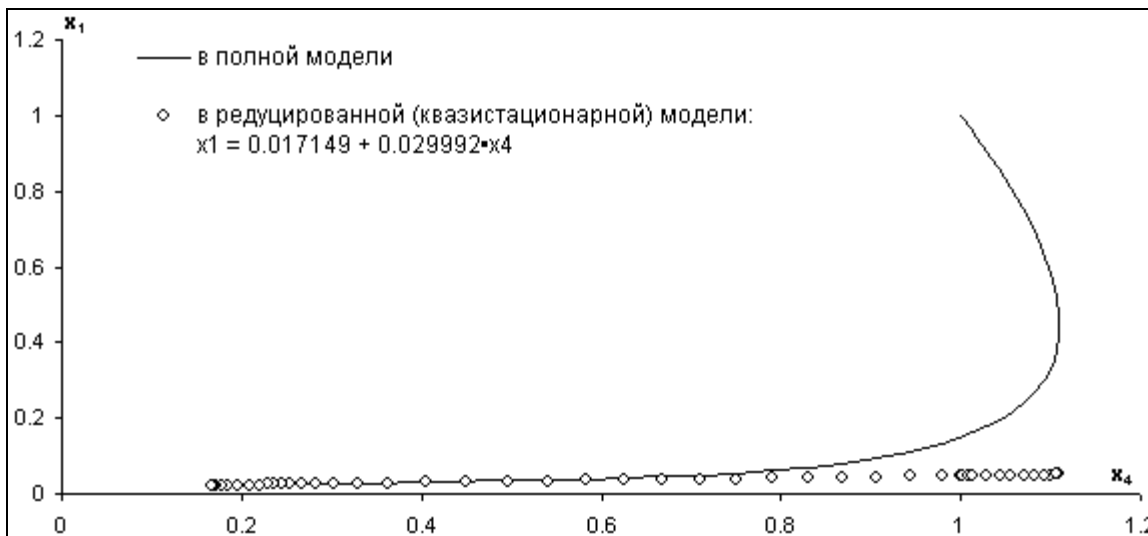


Рис. 2. Взаимосвязь x_1 и x_4 в модели Van der Linden et al. [1987]

Однако вспомним, что при анализе исходной системы мы обнаружили, что переменная x_4 также является быстрой. Следовательно, можно попытаться еще сильнее упростить систему, редуцировав получившиеся пока четыре дифференциальных уравнения к трем (за счет того, что опять вместо одного из дифференциальных уравнений – того, которое описывало быструю переменную x_4 – возникнет простая алгебраическая связь):

$$0.017149 + 0.0986 \cdot x_2 + 0.0081 \cdot x_3 = 0.4699 \cdot x_{s4} \Rightarrow x_{s4} = 0.036495 + 0.209832 \cdot x_2 + 0.017238 \cdot x_3,$$

Итак, мы выразили из условия стационарности x_{s4} и теперь, считая $x_4 \approx x_{s4}$, отбросим соответствующее дифференциальное уравнение, а также избавимся от x_4 во всех оставшихся уравнениях:

$$dx_2/d\tau = 0.7863 - 1.9788 \cdot x_2 + 0.0223 \cdot x_3,$$

$$dx_3/d\tau = 1.5937 \cdot x_2 - 0.1563 \cdot x_3, \quad (\#0)$$

$$0.2191 \cdot dx_5/d\tau = 0.0182 + 0.1597 \cdot x_2 + 0.022 \cdot x_3,$$

Вместо исходных пяти мы теперь имеем лишь три дифференциальных уравнения, причем совместно необходимо решить лишь два первых из них, т.е. фактически мы имеем систему из двух уравнений. Чтобы наглядно убедиться в применимости описанного приема, проинтегрируем численно⁹ исходную и редуцированную (содержащую теперь только 3 дифференциальных уравнения) системы. Сравнение результатов интегрирования исходной и редуцированной систем приведено на рис. 4. Из этого рисунка видно, что динамика переменных x_2, x_3 (количественно!) слабо различается для полной и редуцированной моделей (хотя надо отметить, что различие, все же, чуть больше, чем для предыдущей редуцированной модели, что вполне естественно, поскольку теперь была проведена более существенная редукция). Отклонение редуцированной модели от полной заметно для переменной x_5 . И, конечно, существенное расхождение между полной и редуцированной моделями наблюдается на начальном участке для переменных x_1, x_4 , что немудрено, поскольку в редуцированной модели вообще отсутствуют дифференциальные уравнения для x_1, x_4 , вместо которых используются квазистационарные линейные связи: а) x_4 с x_2, x_3 ; б) x_1 с x_4 , причем, в этом случае, учитывая связь (а), фактически имеем линейную связь x_1 с x_2, x_3 .

Итак, следует признать, что редукция (за счет выделения быстрых и медленных переменных) пяти дифференциальных уравнений к трем дала хороший количественный результат всюду, за исключением небольшого начального участка интервала интегрирования. Другие примеры понижения порядка системы уравнений на основе теоремы Тихонова можно найти, например, в [Романовский и др., 1975, с. 36-38, 41-44; Вавилин и Васильев, 1979, с. 12-14; Ризниченко, 2011, с. 127-130].

Строгая формулировка теоремы Тихонова

Теорема Тихонова устанавливает условия редукции системы обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром (условия замены дифференциальных уравнений для быстрых переменных – алгебраическими) [Ризниченко, 2011: с. 126].

Запишем систему N уравнений, часть из которых содержит малый параметр ε перед производной:

$$\varepsilon \cdot dx_p/dt = F_p(x_1, x_2, \dots, x_r, x_{r+1}, \dots, x_N), \quad p = 1, \dots, r; \quad (\#1)$$

$$dx_q/dt = F_q(x_1, x_2, \dots, x_r, x_{r+1}, \dots, x_N), \quad q = r + 1, \dots, N. \quad (\#2)$$

Назовем систему (#1) *присоединенной*, а систему (#2) – *вырожденной* [Ризниченко, 2011: с. 126].

Решение *полной* системы (#1, #2) стремится к решению *вырожденной* системы (#2) при $\varepsilon \rightarrow 0$, если выполняются следующие условия:

А) решение полной и присоединенной системы единственно, а правые части непрерывны;

Б) решение

$$x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad \dots, \quad x_r = \varphi_r(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

представляет собой изолированный корень алгебраической системы

$$F_p(x_1, x_2, \dots, x_r, x_{r+1}, \dots, x_N) = 0, \quad p = 1, \dots, r;$$

(в окрестности этого корня нет других корней);

В) решение (x_1, x_2, \dots, x_r) – устойчивая изолированная особая точка присоединенной системы (#1) при всех значениях $(x_{r+1}, x_{r+2}, \dots, x_N)$;

⁹ Вообще говоря, система эта столь проста, что проинтегрировать ее можно даже аналитически – см. Приложение 4. Впрочем, и та система, из которой она была получена (т.е. система, содержащая четыре уравнения), тоже могла быть проинтегрирована аналитически в силу своей линейности и невысокого (формально – 4-го, а по сути дела – даже лишь 3-го) порядка.

Г) начальные условия $x_1(t_0), x_2(t_0), \dots, x_r(t_0)$ попадают в область влияния устойчивой особой точки присоединенной системы (т.е. все фазовые траектории из этой области сходятся к особой точке присоединенной системы).

Число начальных условий вырожденной системы меньше, чем полной: начальные значения быстрых переменных не используются в вырожденной системе. Согласно теореме Тихонова, если выполняется условие В), результат не зависит от начальных условий для переменных присоединенной системы [Ризниченко, 2011: с. 126].

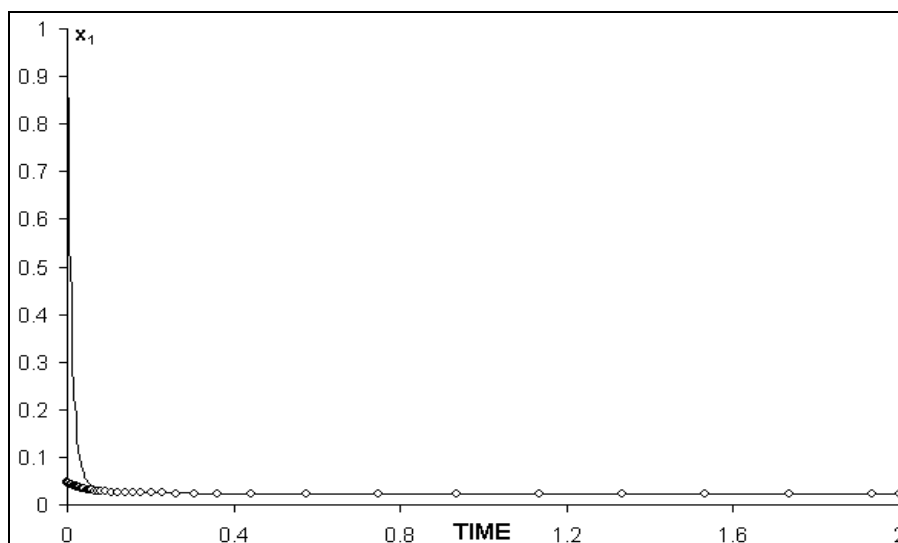
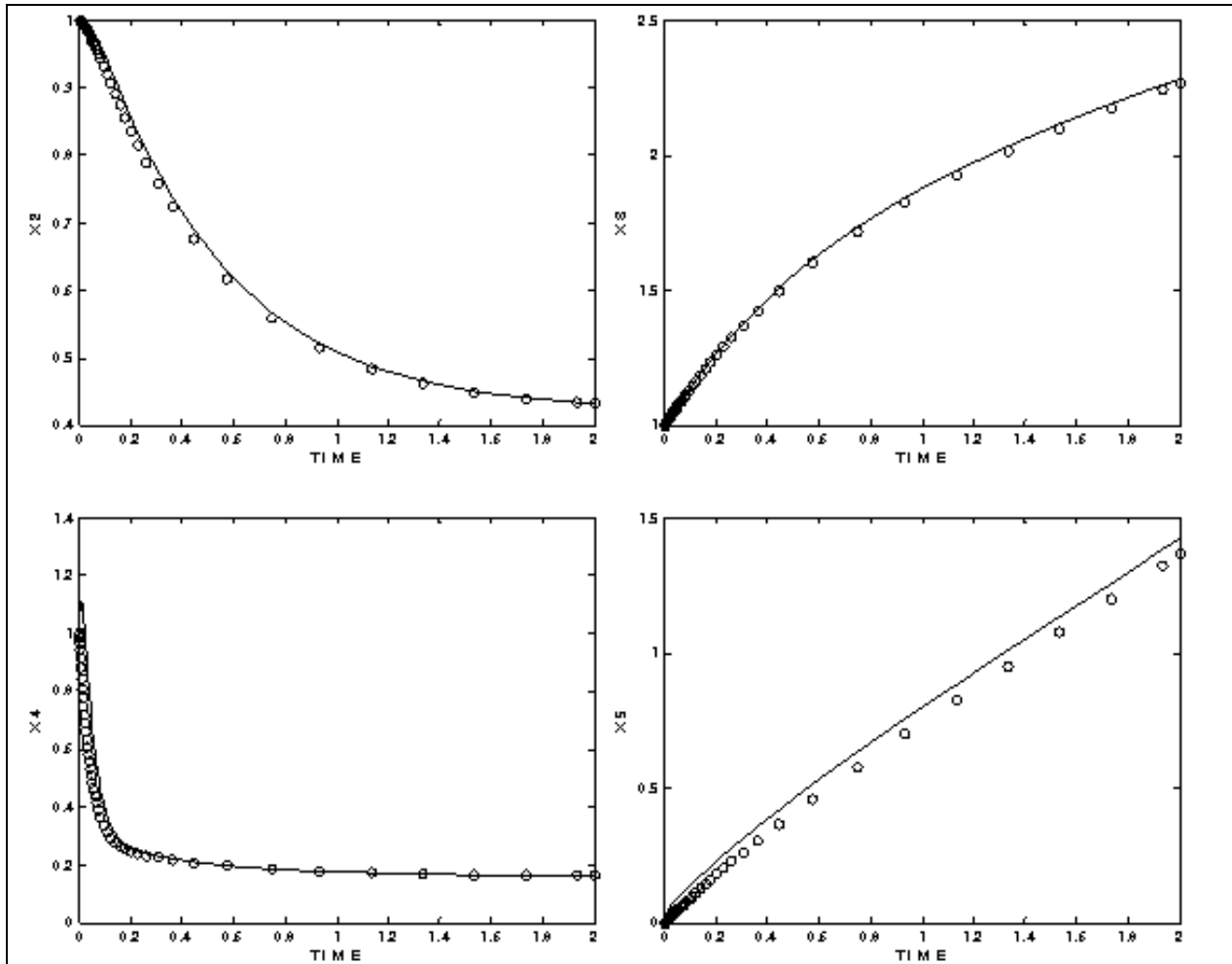


Рис. 3. Сравнение динамики переменных полной (непрерывные линии) и редуцированной к четырем уравнениям (кружочки) модели Van der Linden et al. [1987].

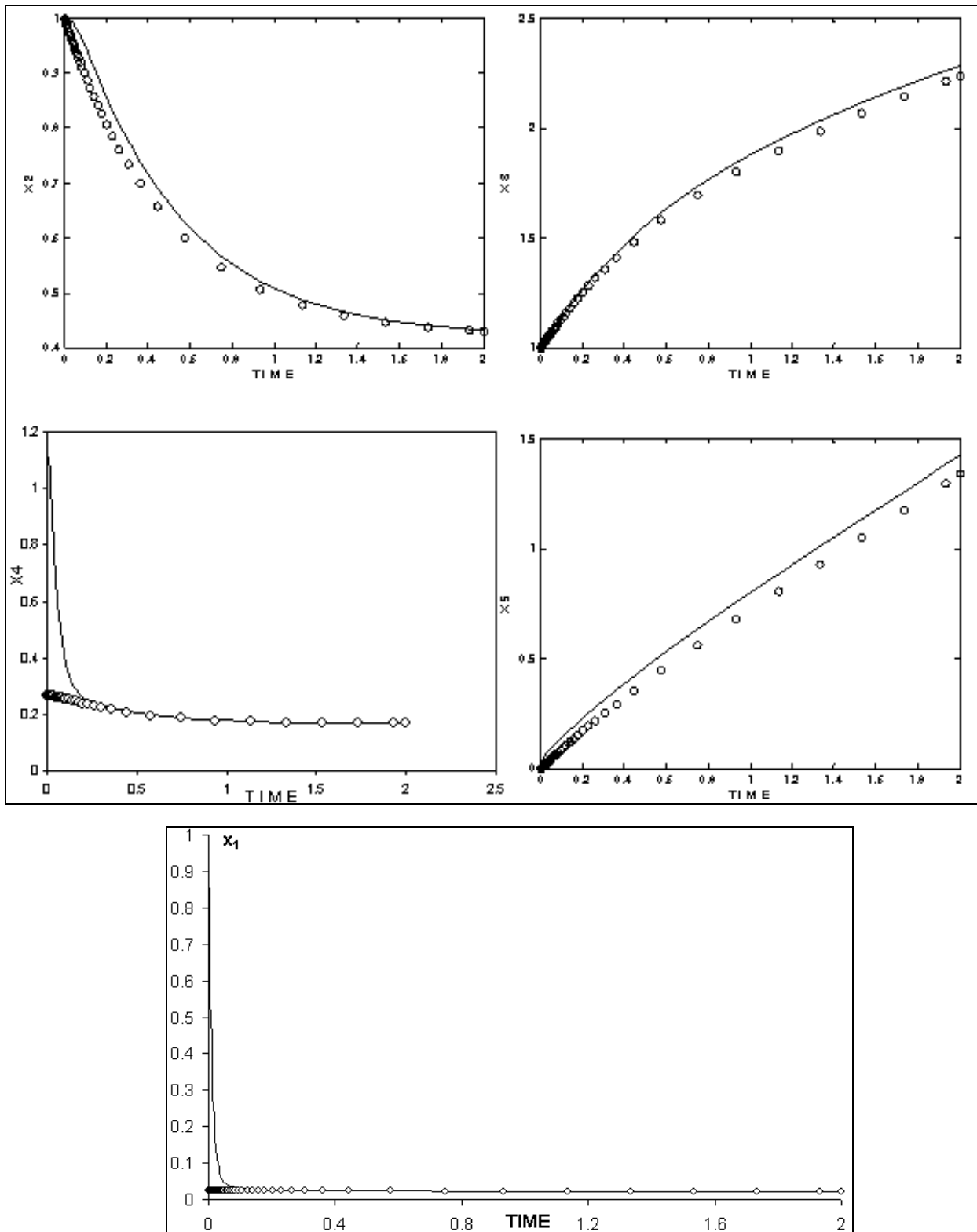


Рис. 4. Сравнение динамики переменных полной (непрерывные линии) и редуцированной к трем уравнениям (кружочки) модели Van der Linden et al. [1987].

ЗАЧЕМ НУЖНО РЕДУЦИРОВАТЬ МОДЕЛЬ К ОДНОМУ МАСШТАБУ?

Оценка количества операций при интегрировании типичных прямых задач биокинетики

Теперь, когда мы познакомились с теорией и конкретной техникой редуцирования математической модели на основе анализа характерных времен описываемых ею процессов, вернемся к вопросу, кратко освещенному во Введении: «зачем это нужно?». На первый взгляд может показаться, что бурное развитие численных методов в последние десятилетия избавило нас от необходимости думать о редукации модели.

Если система уравнений правильно моделирует реальное физическое явление, включающее процессы с существенно различными временными постоянными, то соответствующая задача Коши должна быть жесткой. Для жестких задач типична следующая ситуация: при использовании *классических* явных методов наличие в решении быстро меняющейся *жесткой компоненты* даже на том участке, где ее значение пренебрежимо мало, заставляет выбирать шаг интегрирования из условия абсолютной устойчивости. Для жестких задач это ограничение приводит к неприемлемо малому значению шага. Поэтому численное решение таких задач требует применения специальных неявных методов. Существующие в настоящее время методы решения жестких задач позволяют использовать шаг интегрирования порядка наибольшей из временных постоянных, подчиняя его выбор только требованию точности [Амосов и др., 1994, с. 476, 478-479]. Но основная проблема неявных схем заключается в необходимости решать нелинейную систему уравнений [Ильина и Силаев, 2004, с. 60], для чего требуется итерационный процесс [Влах и Сингхал, 1988, с. 348]. Метод простой итерации не эффективен при решении жестких задач, потому что он приводит фактически к такому же ограничению на размер шага, что и явный метод. По этой причине при решении жестких систем пользуются методом Ньютона. Это приводит к необходимости обращения матрицы [Афанасьев и др., 1990, с. 311-312]. Размерность матрицы зависит от количества (N) дифференциальных уравнений в системе и от конкретного жесткоустойчивого метода.

Например, для неявных методов Рунге-Кутты (MePyK) необходимо обращать матрицу размером $m \cdot N \times m \cdot N$, где m есть число стадий метода, а для полуявных MePyK надо обратить m матриц размерности $N \times N$ каждая (конкретные алгоритмы, на примере которых можно заметить это правило, см., например, в [Новиков и др., 1987; Афанасьев и др., 1990, с. 309-311; Ильина и Силаев, 2004, с. 63-68]). Впрочем, хотя при записи жесткоустойчивого алгоритма принято использовать именно обращение матрицы, на практике, разумеется, осуществляется просто решение системы линейных уравнений.

Если для этого использовать, например, метод Гаусса, то потребуется примерно $2 \cdot N^3/3$ операций на LU-разложение и еще по $2 \cdot N^2$ операций для непосредственного вычисления решения [Амосов и др., 1994, с. 155] на каждой из m стадий MePyK.

Значительно сократить вычислительные затраты при программной реализации неявных и полуявных MePyK можно за счет использования одной и той же матрицы на нескольких шагах интегрирования («замораживание матрицы»). Тестовые примеры типичных задач, решавшихся в [Новиков и др., 1987], показывают, что при решении каждой задачи всего требуется выполнить $n \sim 2^6$ вычислений матрицы Якоби. Таким образом, общее число операций на обращение якобиана при решении типичной жесткой системы составит $M_J = 2 \cdot n \cdot N^2 \cdot (N/3 + m)$. Если принять, что типичная модель из области биологии (экологии) содержит $N \sim 3^2$ уравнений и решается при помощи 3-стадийного MePyK ($m = 3$), то получим $M_J = 2 \cdot 2^6 \cdot 3^4 \cdot (3^2/3 + 3) = 2^8 \cdot 3^5 \approx 6.2 \cdot 10^4$ операций. Конечно, численное интегрирование системы дифференциальных уравнений не сводится только к обращению якобиана. Можно попытаться учесть все остальные необходимые операции (например, легко оценить – сколько вычислений правых частей системы уравнений требуется для каждого вычисления якобиана), однако для приближенной оценки можно пойти другим путем – положить, что общее количество арифметических операций (M_A) при интегрировании системы дифференциальных уравнений пропорционально числу обращений якобиана (с коэффициентом пропорциональности α): $M_A = \alpha \cdot M_J = 2 \cdot \alpha \cdot n \cdot N^2 \cdot (N/3 + m)$, где, как показывает опыт, для небольших систем $\alpha \approx 2 \div 3$ (мы примем $\alpha = 2.5$). Таким образом, представляется, что для типичных прямых задач (ПряЗ) биокинетики вряд ли мы получим число, намного большее, чем $\sim 10^5$. Однако если измерить время выполнения конкретного алгоритма в рамках конкретного программного обеспечения, то часто оказывается, что оно намного больше, чем можно было ожидать на основании этой оценки.

Например, если реальная производительность компьютера (V) при работе в среде MATLAB составляет $2.5 \cdot 10^8$ флอปс¹⁰, то решение простенькой системы из трех уравнений при помощи MATLAB-функции `ode23s` (т.е. методом Розенброка 2-3-порядков) заняло у нас $5 \cdot 10^{-2}$ с. При этом данная функция сообщает, что выполнено всего 38 шагов, на каждом из которых вычислялись частные производные и производилось LU -разложение, а вообще система линейных алгебраических уравнений решалась 114 раз. Таким образом, мы видим, что согласно приведенной выше оценке, решение должно было быть найдено гораздо быстрее. Действительно, имеем: $N = m = 3$, $n = 38$, следовательно: $M_{\text{я}} = 2 \cdot n \cdot N^2 \cdot (N/3 + m) = 2.7 \cdot 10^3$. Вычисление правой части системы уравнений «стоит» 10 умножений (делений) и 10 сложений (вычитаний), следовательно, в процессе решения для вычисления правых частей было выполнено $(10+10) \cdot 230 = 4.6 \cdot 10^3$ операций. Это более чем удвоит M и в сумме даст $7.3 \cdot 10^3$ операций. При производительности $2.5 \cdot 10^8$ флอปс такое количество арифметических операций должно было выполняться за $7.3 \cdot 10^3 / (2.5 \cdot 10^8) \approx 2.9 \cdot 10^{-5}$ с. Конечно, мы не учли различные дополнительные арифметические и логические операции, так что эту оценку следовало бы немного повысить, скажем до $5 \cdot 10^{-5}$ с. Но напомним, что в реальности для получения решения потребовалось $5 \cdot 10^{-2}$ с. Таким образом, время счета $T = \beta \cdot M/V$, где в данном конкретном случае, очевидно, может быть принята следующая грубая оценка: $\beta \sim 10^3$.

Или к этому же возможен другой подход – если оставаться в рамках формального определения T (как отношения M к V), то следует ввести коэффициент β в формулу для M (т.е. при этом как бы считается, что операции действительно делаются с производительностью V , но операций этих существенно больше¹¹). При таком подходе для типичной модели биокинетики имеем: $M = \alpha \cdot \beta \cdot M_{\text{я}} = 2.5 \cdot 10^3 \cdot 6.2 \cdot 10^4 \approx 1.6 \cdot 10^8$. Тем не менее, и такая оценка ясно говорит, что для рассматриваемой задачи неявные и полуявные жесткоустойчивые методы вполне реализуемы даже на персональных компьютерах – ведь при производительности $2.5 \cdot 10^8$ флอปс вычисления займут меньше секунды.

По сути дела, это действительно так, но ведь мы рассмотрели только простейшую задачу. Даже если оставаться в рамках решения Пря3, но ввести в рассмотрение глобальные экологические модели, в которых приходится решать системы уравнений на сетке, покрывающей земную поверхность, то оценки станут уже не столь оптимистическими. Действительно, если рассматривать полуградусную сетку, то на поверхности Земного шара будет $180/0.5 \times 360/0.5 = 2.6 \cdot 10^5$ ячеек, в каждой из которых нужно прорешать систему. Даже если рассматривать только сушу (она занимает 29.2% площади поверхности Земного шара), то и тогда оценка будет не слишком утешительна: $\sim 0.292 \cdot 2.6 \cdot 10^5 \cdot 1.6 \cdot 10^8 = 1.2 \cdot 10^{13}$, что соответствует $1.2 \cdot 10^{13} / (2.5 \cdot 10^8 \cdot 3600) \approx 13$ ч счета.

Но пока мы говорили только о типичных (и потому – относительно простых) Пря3. А ведь существуют и более сложные.

Стандартное программное обеспечение и готовые блоки моделей

Вероятно, при затрате надлежащего количества времени и усилий для любой сколь угодно сложной задачи можно разработать эффективный численный метод, обладающий достаточной универсальностью – решающий не только эту конкретную задачу, но и еще целый ряд задач аналогичного типа. Однако для специалистов, работающих в области, например, математической биологии, главной целью является не разработка новых численных методов, а решение систем уравнений, представляющих собой новые модели. Поэтому в реальности эти специалисты, как правило, не разрабатывают численные методы, а используют некоторое стандартное программное обеспечение (ПО). Но такое ПО, претендуя на универсальность, часто дает сбои при решении некоторых задач. Так, например, один из авторов, регулярно используя в своей практике систему MATLAB, почти столь же регулярно сталкивался с рядом трудностей в применении реализованных в

¹⁰ Мы реализовали следующий простой тест – ввели в командную строку MATLAB:

```
b=0:1/999:1; tic, for i=1:100000, sum(b.*b); end, toc
```

Как видим, по этой команде формируется вектор \mathbf{b} , содержащий 1000 элементов, а затем засекается время, за которое 10^5 раз ЭВМ сможет поэлементно перемножить два вектора \mathbf{b} и сложить все элементы полученного вектора (произведения). Таким образом, в этом тесте 10^5 раз выполняется 10^3 умножений чисел с плавающей запятой и практически столько же сложений. Т.е. всего выполняется $2 \cdot 10^3 \cdot 10^5 = 2 \cdot 10^8$ операций. Поскольку на это затрачивается 0.8 секунды, то получаем производительность $2 \cdot 10^8 / 0.8 = 2.5 \cdot 10^8$ флอปс, что представляется достаточно разумной величиной для процессора с тактовой частотой $1.33 \cdot 10^9$ Гц.

¹¹ Что, в общем-то, тоже правильно – ведь кроме арифметических операций в реальной программе будет множество присвоений, обращений к подпрограммам, проверок логических условий и т.п.

этой системе жесткоустойчивых методов – они не могли найти решение отдельных задач, сложность которых, в общем-то, не сильно отличалась от той, что была характерна для задач, решения которых с легкостью вычислялись. И это вовсе не единичный пример, который мог бы быть объяснен неопытностью или неумением конкретного вычислителя.

Хорошо известна система (из двух дифференциальных уравнений) Линдберга, который показал, что на самом деле норма ее решения уменьшается от начального значения 1.4 до $4 \cdot 10^{-1333}$ при значении независимой переменной $t=0.7$, а затем увеличивается до 10^{34744} при $t=10$, тогда как применение численного метода Гира¹² к этой системе с допустимой локальной погрешностью 10^{-6} дает вначале уменьшение нормы решения до 10^{-10} и затем изменяется мало [Афанасьев и др., 1990, с. 313].

Кроме того, важно отметить одну из современных тенденций в развитии ПО для жестких систем. В последнее время при численном исследовании некоторых жестких задач все большее внимание привлекают *специальные явные методы с расширенными областями устойчивости*¹³ [Новиков, 1997, с. 8]. Вообще говоря, выбор конкретных значений параметров метода интегрирования может осуществляться исходя из различных соображений. Но вполне естественно, что одним из основных является желание сделать порядок аппроксимации максимально возможным [Амосов и др., 1994, с. 441]. Этим путем и шли математики при конструировании классических методов, в результате чего были получены алгоритмы наивысшей возможной точности. Но при построении явных методов с расширенными областями устойчивости значения параметров подбирают так, чтобы максимальной была не точность, а область устойчивости (при этом, разумеется, в точности проигрывают). Например, в [Новиков, 1997, с. 97-109], исходя из структуры метода Рунге-Кутты-Мерсона 4-го порядка точности, длина интервала устойчивости которого примерно равна 3.5, построены (при других значениях коэффициентов) метод 2-го порядка точности, но с интервалом устойчивости, расширенным до 8.6 (!), и метод всего лишь 1-го порядка, но с интервалом устойчивости – до 50 по действительной оси!!! Однако, как бы ни был расширен интервал устойчивости явных методов, он, как видим, все же ограничен.

Поэтому, хотя явные методы с расширенными областями устойчивости и не нуждаются в вычислении якобиана, но они будут предпочтительнее только если жесткость задачи не слишком велика [Новиков, 1997, с. 8]. В связи с этим становится понятна важность элиминирования из задачи самых быстрых переменных (при том, что умеренно быстрые можно оставить). Такая операция, не сильно повредив точности модели, позволит использовать для ее интегрирования явные методы с расширенными областями устойчивости, затраты процессорного времени на которые не превышают затраты на обычные явные методы (разумеется, когда при помощи последних интегрируются нежесткие задачи).

Здесь же сделаем одно замечание. Выше мы предполагали, что жесткая ПряЗ возникла в биокинетической модели каким-то естественным образом при попытке точно описать процессы, идущие в реальной системе. В этом случае всегда будет оставаться сомнение: не «выплеснем ли мы с водой» быстрых компонент «ребенка» – необходимую точность описания. Но в реальности источник жесткости может быть иным. Часто бывает, что специалист, строя какую-то модель, использует целые блоки, созданные ранее другими модельерами. При этом часто оказывается, что эти готовые блоки создавались под другие задачи и, соответственно, под другой временной масштаб, на котором планировалось получить экспериментальные данные. Один из авторов на самой заре своей деятельности встретился со следующим казусом. Ему было поручено исследовать (и развивать) модель микробного роста [Дорофеев и др., 1992], при этом начальство указало конкретное направление развития: необходимо как-то учесть транспорт источника углерода внутрь клетки, и дальнейший рост микробов на этом «внутреннем» субстрате. Более того, для ускорения работ начальство велело ничего самостоятельно не выдумывать, а просто взять у одного из биофизиков,

¹² Процедура, предложенная английским математиком Чарльзом Вильямом (Биллом) Гиром (р. 1935 г.), осуществляющая автоматический контроль погрешности на шаге с изменением по этому критерию как порядка метода, так и шага интегрирования, получила большую популярность к началу 90-х гг. XX-го в. [Афанасьев и др., 1990, с. 313]. Она является одной из лучших при интегрировании жестких дифференциальных уравнений [Влах и Сингхал, 1988, с. 348] и потому широко используется [Амосов и др., 1994, с. 481].

¹³ Кроме того, появление многопроцессорных ЭВМ позволяет иначе рассматривать явные методы, которые легко распараллеливаются [Новиков, 1997, с. 8]. Таким образом, использование явных методов с расширенными областями устойчивости позволяет ускорить вычисления не только в то количество раз, в которое они быстрее, чем неявные методы, но и еще больше – за счет полного использования возможности распараллеливания.

изучающих процессы транспорта, уже разработанную модель такого транспорта и присоединить ее к уравнениям микробиологической кинетики. В результате получился никому не нужный монстр, требующий больших вычислительных ресурсов для подробного **описания в секундном диапазоне молекулярных процессов транспорта**, приводящих к стационарной концентрации вещества в клетке, от которой зависит дальнейший **рост клетки на временах порядка десятков суток** (а именно для описания этого роста и создавалась модель). Аналогичные модели можно встретить и в экологии, когда «в одну повозку» математической модели «впрягают коня» процессов роста фитомассы на временном интервале порядка многих лет и «трепетную лань» быстрых процессов адсорбции/десорбции веществ на почвенных частичках, которую берут у химиков, построивших ее с целью изучения этих процессов в течении часа в лабораторных условиях.

Вероятно, в связи со всем вышеизложенным, в своем знаменитом пособии В.А. Ильина и П.К. Силаев [2004, с. 62] формулируют следующую основную рекомендацию: если есть хоть малейшая возможность выделить нефизические «быстрые» степени свободы, выкинуть их и оставить только интересующие нас «медленные» степени свободы, то, как бы громоздко ни выглядели полученные выражения, лучше это сделать – это окупится как в отношении точности результатов, так и в отношении скорости счета.

Но пока мы говорили только о ПряЗ. А теперь обратим внимание на более сложные обратные задачи (ОЗ) – задачи идентификации коэффициентов (констант) математической модели.

Оценка количества операций при решении типичных обратных задач биокинетики

Если предложенная модель соответствует экспериментальным данным, важно определить численные значения параметров, входящих в уравнения (решение ОЗ¹⁴) [Варфоломеев и Гуревич, 1999, с. 83]. Когда из опыта известны наборы данных, содержащих значения зависимых переменных в различные моменты времени, общий подход к определению неизвестных констант базируется на минимизации функционала, выражающего сумму квадратов отклонений экспериментальных значений от рассчитанных [Коробов и Очков, 2009, с. 133] в области, принадлежность к которой задается условием выполнения большого числа ограничений (наличие ограничений существенно увеличивает сложность задачи минимизации) [Бахвалов и др., 2000, с. 345]. Таким образом, в процессе идентификации возникает необходимость многократного интегрирования систем [Черноруцкий, 2011, с. 353], т.е. приходится многократно решать ПряЗ, чтобы рассчитать по модели значения зависимых переменных (и сравнить их с экспериментально определенными) для различных значений констант. Конкретные оценки тут дать сложно, тем не менее мы постараемся привести пусть и очень приближенную, но, все-таки, количественную информацию.

В настоящее время основным инструментом параметрической оптимизации продолжают оставаться локальные методы, а реальная ситуация в области глобальной оптимизации расценивается как неблагоприятная. Существующие методы поиска «глобального» экстремума, особенно в овражной ситуации, не могут рассматриваться как исчерпывающие¹⁵ при решении задач достаточно высокой размерности. Наиболее распространенный и эффективный эвристический метод заключается в задании некоторой грубой сетки начальных точек в допустимом множестве с последующим применением методов локальной оптимизации [Черноруцкий, 2011, с. 194]. Для построения таких сеток целесообразно применять ЛП_τ-последовательности, обладающие свойством равномерного заполнения многомерной области [Соболь и Статников, 2006]. В качестве начальных точек для локальных процедур спуска могут использоваться только некоторые узлы сетки, которым отвечают наименьшие значения функционала [Черноруцкий, 2011, с. 194]. Пусть k_{Γ} – общее количество точек ЛП_τ-последовательности; $k_{\text{л}}$ – количество начальных точек для локальных процедур спуска; k – количество решений ПряЗ, которое необходимо выполнить для поиска локального минимума, отталкиваясь от одной начальной точки. Тогда получим, что количество операций для решения ОЗ изложенным методом составит $M \cdot (k_{\Gamma} + k \cdot k_{\text{л}})$.

¹⁴ Мы здесь ограничимся только задачей идентификации параметров математической модели, хотя понятие ОЗ гораздо шире и, скажем, задачи управления (см., например, [Петросян и Захаров, 1986; Крутько, 1987; Осипов и др., 1999, с. 15-18]) также могут рассматриваться в качестве ОЗ.

¹⁵ Т.е., фактически, они никогда не дают нам уверенности в том, что найден действительно **глобальный** экстремум. Поэтому-то мы и взяли их слишком многообещающее, но не соответствующее действительности название в кавычки (алгоритмы глобальной оптимизации должны развиваться для достаточно узких классов задач на основе имеющейся априорной информации [Черноруцкий, 2011, с. 194]).

Однозначно ответить на вопрос о том, каким должно быть k_{Γ} нельзя: это зависит от характера изменения функционала. Но во многих решавшихся реальных задачах даже при количестве параметров (P), достигавшем¹⁶ 30, достаточно было выбрать $k_{\Gamma} = 2^7$ или 2^8 . В некоторых задачах с успехом использовалось значение $k_{\Gamma} = 2^9$, а в отдельных задачах k_{Γ} доходило до 2^{12} включительно, хотя существенных уточнений это, как правило, не давало [Соболь и Статников, 2006, с. 22, 33, 38]. Однако, поскольку методология решения реальных задач часто включала в себя повторные пересчеты для $\sim k_{\Gamma}$ точек, то, видимо, в качестве грубой оценки мы можем принять $k_{\Gamma} = 2^{10}$.

Однозначно ответить на вопрос о том, каким должно быть значение k_{Δ} также нельзя (по той же причине, по которой мы не могли дать ответ для k_{Γ}). Но если опять опираться на богатый опыт и здравый смысл И.М. Соболя и Р.Б. Статникова [2006, с. 33, 76, 81, 102], то можно заметить, что $k_{\Delta}/k_{\Gamma} \approx 0.01 \div 0.33$. Видимо, в качестве грубой оценки мы можем принять $k_{\Delta} \approx 3^{-1} \cdot 2^{-1} \cdot k_{\Gamma}$.

Для того, чтобы оценить количество операций при решении типичной ОЗ нам осталось выбрать значение k . Очевидно, что оно будет очень сильно зависеть как от характера изменения функционала, так и от используемого метода локальной минимизации. Разумеется, есть смысл использовать какой-либо из современных эффективных методов минимизации. В качестве такового И.Г. Черноруцкий [2011, с. 283] рекомендует, в частности, процедуру RELCH, приводя для нее следующую оценку количества вычислений функционала (т.е., фактически, количества решений ПряЗ, поскольку вся сложность вычисления суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от модельных сосредоточена, фактически, в получении последних): $k \approx 2 \cdot \gamma \cdot P^2$, где γ – коэффициент заполнения матрицы Гессе. Поскольку, в принципе, для разных задач γ может принимать любые значения от 0 до 1, мы возьмем среднее значение $\gamma = 2^{-1}$.

Вряд ли количество идентифицируемых параметров в типичной задаче будет меньше числа уравнений N . Но и слишком большие значения P (больше N^2) в реальных задачах встречаются весьма редко, поскольку они оказываются не обеспечены экспериментальной информацией. Если взять почти наугад несколько знакомых нам простейших моделей биокинетики, то можно легко оценить соотношение между N и P : в модели Ферхюльста-Пирла $N = 1$, $P = 2$; в модели МакКендрика-Пая с отмиранием $N = 2$, $P = 3$; в модели Моно с отмиранием $N = 2$, $P = 4$; в модели Van der Linden et al. $N = 5$, $P = 10$. «Для статистики» добавим к ним еще две модели Н.Ф. Бондаренко и др. [1981] с $N = 5$, $P = 9$ и $N = 6$, $P = 16$, а также модель Кенейла [Вавилин и Васильев, 1979, с. 17-18] с $N = 3$, $P = 6$ и модель симбиотрофной метангенерирующей ассоциации [Варфоломеев и Гуревич, 1999, с. 672-678] с $N = 9$, $P = 39$. Из этих данных представляется, что связь $P \approx N^2 \cdot 2^{-1}$ является вполне хорошим приближением для использования в наших грубых оценках. Итак, получаем для количества операций при решении ОЗ: $\alpha \cdot M \cdot (k_{\Gamma} + k \cdot k_{\Delta}) = \alpha \cdot M \cdot k_{\Gamma} \cdot (1 + 2 \cdot \gamma \cdot N^4 \cdot 2^{-2} \cdot 3^{-1} \cdot 2^{-1}) \approx 2.5 \cdot 1.6 \cdot 10^8 \cdot 2^{10} \cdot (1 + 2 \cdot 2^{-1} \cdot 3^4 \cdot 2^{-2} \cdot 3^{-1} \cdot 2^{-1}) \approx 2 \cdot 10^{12}$ (мы опять учли коэффициент α , поскольку для реализации минимизации необходимо не только вычисление гессиана и градиента).

К сожалению, подобные грубые оценки вряд ли могут иметь точность лучше, чем порядок. Т.е. вполне может оказаться, что для решения задачи потребуется не 10^{12} , а $\sim 10^{13}$ операций (таким образом, мы получили, что решение ПряЗ для глобальной экологической модели примерно соответствует по вычислительным затратам решению ОЗ для обычной модели биокинетики).

Необходимость использования в такой ситуации редукции модели для упрощения (ускорения) решения ОЗ была, по-видимому, еще раньше, чем в биологии, осознана в химии при решении ОЗ химической технологии. Так, в известном учебнике И.Г. Черноруцкого [2011, с. 353] при описании параметрической идентификации кинетических моделей полимеризационных процессов читаем: «Существенный разброс... в значениях констант скоростей элементарных реакций приводит к свойству жесткости систем дифференциальных уравнений..., что определяет известные вычислительные трудности при их интегрировании... В то же время универсальные методики интегрирования жестких систем типа методов Гира, Хиндмарша и аналогичных им в силу своей громоздкости требуют заметных вычислительных затрат, хотя и превосходят... явные схемы по скорости... В процессе идентификации... уже незначительная экономия времени при решении задачи одновариантного анализа может оказаться решающей. Возникает проблема разработки специальных методов интегрирования с учетом характерных значений...».

Конечно, тут может возникнуть вопрос: как же можно говорить о редукции системы уравнений **до** решения ОЗ определения ее коэффициентов – ведь редукцию мы осуществляем как раз на основе знания численных значений коэффициентов. Но дело в том, что характерные величины некоторых

¹⁶ Был проведен и уникальный расчет: многокритериальная (4 критерия при 4 ограничениях) минимизация в пространстве 1000 (!!!) параметров. При этом задавалось $k_{\Gamma} = 2 \cdot 10^5$, а k_{Δ} составило 4297 [Соболь и Статников, 2006, с. 132].

коэффициентов могут быть часто известны (на уровне порядка величины) априори из их физического смысла. Например, физические процессы (скажем, адсорбция/десорбция) и химические реакции обычно проходят быстрее биологических процессов роста/отмирания организмов, а в рамках биологической кинетики удельные скорости роста более мелких организмов существенно превышают таковые для более крупных. Таким образом, если у нас есть система, описывающая, например, процесс адсорбции микробов на почвенных частицах, их рост и взаимодействие с высшими растениями, то, даже не зная точных численных значений всех коэффициентов можно сразу выделить иерархию характерных времен. Адсорбция/десорбция микробов в этой системе будет быстрым процессом и его можно заменить квазистационарным алгебраическим соотношением, динамика высших растений будет процессом медленным и ее можно не рассматривать как собственно динамику. Таким образом, исходя из физического смысла полную систему можно априори редуцировать до дифференциальных уравнений роста микроорганизмов (дополненных квазистационарными сорбционными соотношениями и постоянными источниками, описывающими поступление органического вещества для роста микробов за счет корневых выделений растений).

Однако решение ОЗ не сводится лишь к рассмотренному выше чисто количественному аспекту. Если бы это было так, то, по сути дела, все проблемы постепенно снялись бы с развитием вычислительной техники. Но один из авторов данной статьи в прошлом веке начинал работать на ЭВМ «Мир» (быстродействие – около 10^3 флор), и вот дожил до возможности выполнения вычислений на суперкомпьютерах «Чебышев» и «Ломоносов» (реальное быстродействие – около $5 \cdot 10^{13}$ и $9 \cdot 10^{14}$ флор, соответственно). Тем не менее многие ОЗ решаются сейчас так же плохо, как они решались тогда – в прошлом веке.

Для нахождения точки глобального минимума, вообще говоря, не остается ничего иного, как найти все точки локального минимума и, сравнивая вычисленные в этих точках значения целевой функции, выделить среди них точку глобального минимума. Однако такой подход связан с чрезмерно большими вычислительными затратами и вряд ли перспективен [Амосов и др., 1994, с. 263]. Более того, к сожалению, для произвольного функционала задача глобальной оптимизации неразрешима с помощью вычислений этого функционала в любом *сколь угодно большом*, но конечном числе точек [Черноруцкий, 2011, с. 194]. Поэтому на практике чаще используется другой подход к нахождению точки глобального минимума, который состоит в том, чтобы определить ее местоположение из анализа самой решаемой задачи, а затем применить для вычисления один из методов поиска точки локального минимума [Амосов и др., 1994, с. 263]. Если говорить не вообще о всех задачах минимизации, а только о минимизации функционала ошибки при решении ОЗ, то здесь данный подход выражается в том, чтобы проанализировать свойства модели, аппроксимирующей экспериментальные данные, и установить количественные связи между параметрами модели и ее качественными особенностями (например, установить – от каких параметров зависит положение и высота экстремума или период и фаза колебаний). Из этого анализа можно (разумеется, используя экспериментальные данные) получить грубые оценки параметров, которые позволяют воспроизвести качественно правильное поведение модели. А вот максимально хорошего количественного совпадения добиваются уже за счет метода численной минимизации функционала ошибки (причем тут, как правило, оказывается вполне достаточно алгоритмов локальной минимизации). Но анализировать качественные свойства модели гораздо удобнее при наличии аналитического решения, которое часто оказывается возможным получить для редуцированной модели.

Многомерные задачи: уравнения в частных производных

И в заключение вернемся опять к ПряЗ, но теперь остановимся не на сосредоточенных, а на пространственно-распределенных системах, причем рассмотрим в качестве единственного примера одну из наиболее сложных задач этого класса – моделирование климата.

Моделирование климата выделилось из задачи предсказания атмосферной погоды несколько десятилетий назад и в последние годы приобрело особую актуальность в связи с выходом Четвертого оценочного доклада Международной группы экспертов по изменениям климата. Эволюция состояния атмосферы и океана описывается системой нестационарных трехмерных уравнений Рейнольдса в частных производных (осредненные уравнения Навье-Стокса), состоящей из 4-5 трехмерных эволюционных уравнений с рядом приближений. При развитии моделей климата принималось, чтобы вычислительные эксперименты длились не более 10 суток, и за этот срок можно было бы рассчитать 100-1000 лет модельного времени [Толстых и др., 2013, с. 9-10, 12].

Улучшение качества модельного климата может быть достигнуто за счет улучшения параметризации подсеточных процессов и улучшения пространственного разрешения. Однако

вычислительная стоимость параметризаций ниже, чем стоимость повышения разрешения. Вначале климатические модели были фактически моделями атмосферы с фиксированной температурой поверхности океана. В дальнейшем климатические модели развивались в направлении большего усложнения, в них включались модели океана, почвы, криосферы и т.д. [Толстых и др., 2013, с. 11-12].

В качестве примера можно привести расширение в 2010-2011 гг. климатической модели CCSM (Community Climate System Model)¹⁷ до CESM (Community Earth System Model), в рамках которого, в частности, было осуществлено добавление модели углеродного цикла и наземного льда. Однако эффективность оказалась ниже неофициальной планки и составляет 3 модельных года за сутки счета на 20 000 ядер суперкомпьютера Cray (следовательно, за 10 суток можно посчитать лишь 30 модельных лет, а вовсе не 100 и уж, тем более, не 1000). В качестве второго примера упомянем Flexible Model System¹⁸, появившуюся в 2001 г. для объединения отдельных моделей (в том числе, океана, суши, морского льда, биосферы), разрабатываемых разными научными группами [Толстых и др., 2013, с. 46-47, 53-54, 56].

Моделирование климата всегда являлось областью применения самых мощных для своего времени вычислительных систем: хотя размерность пространственной области в 10-100 раз меньше чем, например, размерность области в моделях прогноза погоды¹⁹, но требуется проведение массовых расчетов (например, по различным сценариям увеличения концентраций парниковых газов) на столетия модельного времени [Толстых и др., 2013, с. 12, 14-15]. Думаем, вышесказанного вполне достаточно, чтобы осознать сложность вычислительной задачи и тот очевидный факт, что любое упрощение системы уравнений этой ситуации крайне желательно.

¹⁷ CCSM была разработана в Argonne National Laboratory в сотрудничестве с группой Национального Центра Атмосферных Исследований [Толстых и др., 2013, с. 46, 50].

¹⁸ Проект Лаборатории Геофизической Гидродинамики США [Толстых и др., 2013, с. 53].

¹⁹ Размерность вычислительной области в современных глобальных моделях погоды составляет $1000 \times 1000 \times 100 = 10^8$, что определяется необходимостью разрешения мезомасштабных синоптических процессов [Толстых и др., 2013, с. 14-15].

ПРИЛОЖЕНИЕ 1: Модель МакКендрика-Пая и уравнение Ферхюльста-Пирла²⁰

Мало какая литература по биологической кинетике или по математическому моделированию экологических процессов обходится без упоминания классического уравнения Ферхюльста-Пирла. Напротив, модель МакКендрика-Пая практически никогда не упоминается (из числа соавторов данной статьи лишь одному была известна лишь одна отечественная книга, в которой этой модели отдавалось должное, но эта уникальная книга в 1998 г. была у него украдена и с тех пор попытки где-либо приобрести ее или хотя бы вспомнить ее название не привели к успеху). Данный раздел мы написали, в основном, ради восстановления исторической справедливости в отношении модели МакКендрика-Пая, уравнение же Ферхюльста-Пирла упоминается лишь постольку, поскольку оно тесно связано с указанной моделью и в некотором смысле обосновывается ею.

Обычно в биокинетической литературе (см., например, [Перт, 1978; Вавилин и Васильев, 1979; Абросов и др., 1982; Паников, 1992]) рождение биологической кинетики явно или неявно²¹ связывается с именами А. Lotka (1925 г.), J.B.S. Haldane (1930 г.), V. Volterra (1931 г.), Г.Ф. Гаузе (1934-1936 гг.), С.N. Hinshelwood (1946 г.) и в наиболее значительной степени с работами 1940-1950 гг. нобелевского лауреата Жака Люсьена Моно. Из более ранних исследователей крайне редко²² упоминаются М. Müller (1895 г.), первым обнаруживший наличие лаг-периода в развитии бактериальной культуры и сформулировавший понятия логарифмического и замедляющегося роста; Н.М. Ward (1896 г.), одним из первых начавший производить биометрические наблюдения за ростом микроорганизмов; F.F. Blackman (1905 г.), сформулировавший «принцип узкого места» (хотя сам этот термин возник позднее): отмечая колоссальное множество ферментов в любой клетке, он высказал предположение, что скорость роста клетки в целом определяется одной единственной ферментативной реакцией («управляющая реакция», или «master reaction»), которая выделяется по кинетическому принципу – это самая медленная реакция²³ из всех метаболических процессов; М.А. Егунов (1914 г.), предложивший уравнение для описания роста грибных и бактериальных колоний на агаризованных средах; R.E. Buchanan (1918 г.), предложивший для 6 фаз роста микроорганизмов (лаг-фазы, фазы экспоненциального роста, фазы отрицательного ускорения роста, стационарной фазы, фазы ускорения отмирания и фазы экспоненциального отмирания) эмпирические зависимости $\mu(t)$ в решении уравнения Мальтуса.

Кратко воззрения микробиологической кинетики начала XX в. хорошо охарактеризованы в [Паников, 1992, с. 12-13]: Slatog (1916 г.) вместо времени генерации предложил использовать тесно связанную с ним удельную скорость роста μ (которую он называл «ростовой константой»); при этом величину μ считали «в норме» постоянной для данного вида, а снижение μ при переходе к постэкспоненциальным фазам роста рассматривалось как отклонение от нормы, либо как результат некоторой внутренней «программы развития культуры». Прямому изучению влияния факторов среды на μ уделяли мало внимания, за исключением, пожалуй, одного фактора – температуры (для описания зависимости скорости микробиологического процесса от абсолютной температуры применяли эмпирическое уравнение Аррениуса).

²⁰ В нашем курсе лекций «Математическое моделирование биологических процессов» этот материал входит в лекцию, предшествующую лекции о приложениях теоремы Тихонова.

²¹ Т.е. перечисленные далее авторы могут и не объявляться явным образом «отцами» биологической кинетики, но у читателя все равно складывается такое впечатление, поскольку никакие другие (более ранние) исследователи не упоминаются.

²² Например, из четырех перечисленных выше книг, только одна уделила им хоть какое-то внимание.

²³ Поскольку принцип узкого места является одним из краеугольных камней биокинетики и до сих пор привлекается для обоснования применимости уравнений ферментативной кинетики для описания роста микробных популяций (см., например, [Вавилин и Васильев, 1979: с. 11; Полуэктов и др., 1980: с. 45; Эндрюс, 1981: с. 323; Варфоломеев и Гуревич, 1999: с. 560]), то мы считаем необходимым отметить, что принцип узкого места ни в коем случае не следует абсолютизировать. Согласно Н.С. Паникову [1992: с. 20], это понял еще A.L. Burton (1936 г.), отмечавший, что 1) чем длиннее метаболический путь, тем в меньшей степени скорость образования конечного продукта зависит от скорости самой медленной реакции; 2) истинно управляющая реакция не обязательно должна быть самой медленной, важнее ее место в цепи по отношению к обратимым и необратимым стадиям, узкое место должно быть локализовано перед первой необратимой реакцией (строгое математическое рассмотрение медленных переходных процессов в системах химических реакций, полезное для более глубокого понимания «принципа узкого места», можно найти в [Горбань и Чересиз, 1993]).

Модель МакКендрика-Пая

$$\begin{cases} dX/dt = \alpha \cdot s \cdot X \\ ds/dt = -\alpha \cdot s \cdot X/Y, \end{cases}$$

(где X и s – концентрации, соответственно, микроорганизмов и питательного субстрата для их роста; α – коэффициент, определяющий скорость роста; Y – «экономический коэффициент») можно легко проинтегрировать, выразив одну зависимую переменную через другую (например, s через X), и подставив полученное выражение в любое из уравнений системы. Выразить же s через X можно, интегрируя дифференциальное уравнение, получающееся делением одного уравнения системы на другое. Итак,

$$dX/ds = -Y \Rightarrow X = -Y \cdot s + X_{max},$$

где X_{max} – постоянная интегрирования, значение которой можно определить из начального условия. В начальный момент времени $s = s_0$ и $X = X_0$, поэтому

$$X_{max} = X_0 + Y \cdot s_0.$$

Таким образом, X и s связаны линейным соотношением

$$X = X_0 + Y \cdot s_0 - Y \cdot s.$$

Кстати, отсюда становится очевидным физический смысл константы X_{max} . Поскольку в определении экономического коэффициента отмирание никак не учитывалось, то, очевидно, X и X_0 – это общая (а не только живая) биомасса. Но раз так, то тогда, когда субстрат будет полностью исчерпан (т.е. когда станет $s = 0$), мы будем иметь максимальное количество биомассы (как раз по счастливой случайности мы уже обозначили константу интегрирования именно через X_{max}).

Имея теперь связь между X и s , выразим s через X

$$s = X_0/Y + s_0 - X/Y.$$

и подставим получившееся выражение в первое уравнение системы:

$$dX/dt = \alpha \cdot X \cdot (X_0/Y + s_0 - X/Y) \Rightarrow dX/dt = \alpha \cdot X \cdot (X_0 + Y \cdot s_0 - X)/Y \Rightarrow dX/dt = \alpha \cdot X \cdot (1 - X/X_{max}) \cdot X_{max}/Y.$$

Обозначим комплекс констант $\alpha \cdot X_{max}/Y$ через r , тогда мы приходим к одной из форм логистического уравнения Ферхюльста-Пирла:

$$dX/dt = r \cdot X \cdot (1 - X/X_{max}),$$

полученного, впрочем, Ферхюльстом из несколько других соображений. Уравнение это столь простое, что безо всякого интегрирования поведение его решения очевидно прямо из самого уравнения. Действительно, при малых значениях X (под малыми мы в данном случае понимаем $X \ll X_{max}$) член $X/X_{max} \ll 1$, и им можно пренебречь. Таким образом, при малых X уравнение Ферхюльста-Пирла сводится к уравнению Мальтуса ($dX/dt = r \cdot X \Rightarrow X = X_0 \cdot e^{rt}$). Иначе говоря, в самом начале роста биомасса увеличивается практически экспоненциально. Но чем дальше – тем сильнее рост замедляется по сравнению с экспоненциальным (поскольку с увеличением X член X/X_{max} становится все ближе к единице и, следовательно, $1 - X/X_{max}$ становится все ближе к нулю). В конце концов, когда X практически достигает²⁴ X_{max} , рост уже совершенно останавливается и в дальнейшем концентрация биомассы всегда остается на уровне $X = X_{max}$.

²⁴ Точнее говоря, с математической точки зрения, X никогда не достигнет X_{max} , но может достичь ЛЮБОЕ меньшее значение за конечное время [Вольтерра, 1976: с. 19], так что практически можно считать, что X достигает X_{max} когда разность $(X_{max} - X)$ становится пренебрежимо малой или теряет биологический смысл, например, если $(X_{max} - X)$ становится меньше 1 при том, что X_{max} и X измеряются в количествах особей.

Интегрирование логистического уравнения с начальным условием $X(0) = X_0$ приводит к следующему соотношению²⁵ [Свирижев, 1976, с. 246; Полуэктов и др., 1980, с. 112; Федоров и Гильманов, 1980, с. 189]:

$$X = X_{max} \cdot X_0 / [X_0 + (X_{max} - X_0) \cdot \exp(-r \cdot t)].$$

Так называемую «логистическую» модель роста популяций Ферхюльст предложил в 1838 г. Эта модель описывала ограниченный рост популяций за счет существования двух процессов, влияющих на численность популяции: процесса рождения и процесса «квадратичной» гибели [Варфоломеев и Гуревич, 1999, с. 541-542].

Утверждение о том, что уравнение Ферхюльста-Пирла получено с учетом отмирания организмов часто встречается в литературе – см., например, [Федоров и Гильманов, 1980, с. 188; Паников, 1992, с. 15; Варфоломеев и Гуревич, 1999, с. 542; Дулов и др., 2005, с. 150]. Однако, как мы видели выше, оно может быть получено на основе представлений об исчерпании питательного субстрата неотмирающей популяцией. И такая интерпретация также нашла отражение в литературе – см., например, [Джефферс, 1981, с. 32]. Интересно отметить, что такой классик математической экологии, как Вольтерра [1976, с. 15, 234] интерпретировал логистическое уравнение также в терминах питания организмов, придавая величине r/X_{max} смысл потребности вида в пище. Относительно же параметра X_{max} он совершенно определенно писал: «Количество пищи определяет верхний предел увеличения каждого вида».

Наконец, существует литература (см., например, [Гроссман и Тернер, 1983, с. 242, 303]), где в рамках одной и той же книги в одном разделе правая часть логистического дифференциального уравнения интерпретируется как разность между размножением и отмиранием, а в другом разделе указывается, что «Логистическое уравнение отражает рост популяции в ограниченной по ресурсу среде. Благодаря тому, что запасы одного или нескольких важных ресурсов ограничены, численность популяции не может увеличиваться до бесконечности...».

Заметим, что уравнение Ферхюльста-Пирла может быть получено и чисто логическим путем без каких-либо конкретных представлений о конкуренции или исчерпании субстрата. Рассмотрим скорость роста популяции (dX/dt). Не вводя в рассмотрение каких-либо дополнительных переменных типа концентраций питательного субстрата или продукта роста культуры, могущего ее ингибировать, ограничимся лишь возможной зависимостью скорости роста биомассы от ее концентрации. Конкретная функциональная зависимость нам не известна, но вполне достаточно самого общего (и совершенно очевидного!) предположения, что она существует:

$$dX/dt = f(X).$$

Представим функцию $f(X)$ в виде ряда Маклорена

$$f(X) = a_0 + a_1 \cdot X + a_2 \cdot X^2 + \dots$$

и ограничимся в разложении как можно меньшим числом членов, достаточным, тем не менее, для того, чтобы передать основные качественные особенности реальной динамики биомассы. Прежде всего, совершенно очевидно, что $a_0 = 0$. Действительно, предположим, что $a_0 > 0$. Но это является математическим воплощением гипотезы самозарождения – ведь если изначально биомасса в культуре отсутствовала (чему соответствует начальное условие $X_0 = 0$), то она все равно начнет нарастать с постоянной скоростью $dX/dt = a_0$, т.е. возникнет ниоткуда. Предположим теперь, что $a_0 < 0$. Если гипотеза самозарождения, все-таки, несколько тысячелетий продержалась в науке, то при $a_0 < 0$ мы имеем уже полный абсурд с чисто логической точки зрения – ведь если изначально биомасса в культуре отсутствовала (чему соответствует начальное условие $X_0 = 0$), то она все равно начнет убывать с постоянной скоростью $dX/dt = a_0$, а значит станет... отрицательной! Отрицательная биомасса не имеет смысла.

Перейдем теперь к параметру a_1 . Если отбросить все остальные члены разложения $f(X)$, оставив лишь a_1 , то мы будем иметь упомянутое выше уравнение Мальтуса, имеющее своим решением неограниченный экспоненциальный рост, который в реальности не может наблюдаться вечно. Тогда

²⁵ Удивительно, но иногда это классическое уравнение неправильно интегрируется даже ведущими биокинетиками современности. Так, например, неверно проинтегрировано оно в [Варфоломеев и Гуревич, 1999: с. 557], как это легко установить из соображений размерности. К счастью, далее авторы представляют решение в несколько иной форме, обозначенной ими как (5.14), и в этой формуле ошибки уже нет.

оставим два члена: a_1 и a_2 . Если $a_2 > 0$, то мы вновь имеем неограниченный рост, что опять противоречит реальным наблюдениям о росте популяций и представлениям здравого смысла. А вот если $a_2 < 0$, то мы как раз и получаем одну из эквивалентных форм логистического уравнения:

$$dX/dt = a_1 \cdot X + a_2 \cdot X^2 \Leftrightarrow dX/dt = r \cdot X \cdot (1 - X/X_{max})$$

где $r = a_1$, $X_{max} = -a_1/a_2$.

Дулов и др. [2005, с. 150] называют логистическое уравнение Ферхюльста-Пирла «уравнением Вольтерра», сообщая, что оно было получено V. Volterra в 1931 г. Действительно, в книге В. Вольтерра [1976, с. 20] такая формула есть. Но Вольтерра рассматривает более сложный случай взаимодействия двух популяций и при некоторых частных предположениях приходит к логистическому уравнению. Т.е. оно не является целью математических выкладок, а просто появляется в цепочке преобразований, как и многие другие уравнения. Безусловно, Вито Вольтерра являлся выдающимся математиком и математическим экологом, но если все формулы, появившиеся в процессе математических преобразований в работах Вольтерра называть его именем, то вряд ли в математике останется хоть что-то²⁶, что не будет носить названия «уравнение Вольтерра», «неравенство Вольтерра» или «формула Вольтерра».

Все-таки, логистическое уравнение предложил Ферхюльст (в первой половине XIX-го в.). Правда, Ферхюльстом оно рассматривалось лишь применительно к теории роста народонаселения. Затем много позже Пирл и Рид (1923 г.) применили его к биологическим системам вообще, а еще через несколько лет область применения уравнения опять расширилась – Кузнец (1930 г.) применил его к системам экономическим [Полуэктов и др., 1980, с. 112].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2: MATLAB-функция для интегрирования модели Van der Linden et al.

```
function [T,Y]=Example4_vanDerLindenModel
%*****
%      ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ПОЧВЕННОГО УГЛЕРОДА      *
%      Van der Linden et al. [1987], ЗАПИСАННОЙ В БЕЗРАЗМЕРНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ  *
%*****
%      ЛИТЕРАТУРА: Van der Linden A.M.A., Van Veen J.A., Frissel M.J. 1987 // *
%      Plant and Soil, V. 101, P. 21-28. *
%*****
time= [0 1]; % Интервал времени, для которого будет построено решение
%      НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ МАСС:
Y0 = [1 % Легкоразлагающиеся органические в-ва, такие как белки и углеводы
      1 % Более труднорастворимые органические вещества
      1 % Старое органическое в-во, наиболее сильно устойчивое к разложению
      1 % Микробы, осуществляющие р-ции разложения перечисленных выше в-в
      0]; % Углекислый газ, выделившийся в этих процессах разложения
[T,Y] = ode23s(@vanDerLindenModel,time,Y0); % Обращаемся к решателю ОДУ
%      СТРОИМ ГРАФИК
plot(T,Y(:,1),'k',T,Y(:,2),'k--',T,Y(:,3),'k:',T,Y(:,4),'k-.',T,Y(:,5),'k.')
xlabel('Time'), ylabel('Mass') %Подписываем оси координат
legend('x1','x2','x3','x4','x5','Location','NorthWest')
%*****
%      ФУНКЦИЯ, ЗАДАЮЩАЯ ПРАВУЮ ЧАСТЬ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ *
%*****
function dy=vanDerLindenModel(t,y)
x1=y(1); x2=y(2); x3=y(3); x4=y(4); x5=y(5);
dy=[-100*x1 + 2.9992*x4 + 1.7149
     - 2.25*x2 + 1.2926*x4 + 0.7391
     1.5937*x2 - 0.1563*x3
     50.0127*x1 + 4.9319*x2 + 0.4030*x3 - 25*x4
     4.5633*x1 + 0.7000*x2 + 0.0980*x3];
```

²⁶ Как известно, в каждой шутке есть доля правды... Напомним, что еще будучи подростком, Вольтерра изучил дифференциальное исчисление, однако интегрального исчисления не знал. Когда же последнее понадобилось ему (для поиска решения известной задачи трех тел), Вольтерра самостоятельно вновь открыл интегральное исчисление [Свиричев, 1976: с.247], разработанное ранее Лейбницем и Ньютоном!

ПРИЛОЖЕНИЕ 3:

Аналитическое решение уравнения Ферхюльста-Пирла методом вычеркивания
 В книге В.И. Кузнецова и др. [2006] приводится уравнение Ферхюльста-Пирла²⁷ в виде:

$$\frac{du}{dt} = Au - Bu^2 \quad (1)$$

Это уравнение в указанной книге интерпретируется как модель динамики отдельно взятой популяции, в частности, монокультурного леса с внутривидовой конкуренцией. Первое слагаемое в правой части описывает прирост биомассы, который пропорционален первой степени, искомая функция u интерпретируется как биомасса леса. Второе слагаемое представляет разложение биомассы. Это уравнение с разделяющимися переменными, поэтому умножаем уравнение (1) на $\frac{dt}{(Au - Bu^2)}$, получаем:

$$du/[u \cdot (A - B \cdot u)] = dt \quad (2)$$

Интеграл в левой части уравнения (2) представляет собой рациональную дробь, корни знаменателя которого вещественны и различны. В этом случае рациональная дробь раскладывается на сумму простейших вида $\frac{A_1}{u}$ и $\frac{A_2}{(A - Bu)}$, коэффициенты которого в данном случае легко найти методом вычеркивания, изложенного в учебнике [Ильин и Позняк, 1982, с.216].

Интегрируем уравнение (2), используя разложение рациональной дроби:

$$\int \frac{du}{u(A - Bu)} = \int \frac{A_1 du}{u} + \int \frac{A_2 du}{(A - Bu)} \quad (3)$$

Коэффициенты A_1 и A_2 находятся методом вычеркивания:

$$A_1 = \frac{1}{(A - Bu)} \Big|_{u=0} = \frac{1}{A}, \quad A_2 = \frac{1}{u} \Big|_{u=A/B} = B/A.$$

Суть метода вычеркивания для вычисления коэффициентов разложения правильной рациональной дроби на сумму простейших заключается в том, что коэффициент разложения равен значению рассматриваемой рациональной дроби, в которой из знаменателя вычеркивается тот элемент, который стоит в знаменателе слагаемого суммы и вычисляется при том значении аргумента, в котором «вычеркнутое» выражение обращается в ноль. Например, в формуле (3) коэффициент A_1 стоит при дроби вида $\frac{1}{u}$. Поэтому для вычисления этого коэффициента из рациональной дроби убирается множитель u , полученное выражение вычисляется при $u = 0$. Коэффициент A_2 стоит при дроби $\frac{1}{(A - Bu)}$, знаменатель которой обращается в ноль при $u = A/B$.

Подставляя найденные коэффициенты в (3) и интегрируя, получаем:

$$\int \frac{du}{(Au - Bu^2)} = \frac{1}{A} \ln|u| - \frac{1}{A} \ln|u - A/B| \quad (4)$$

Правая часть уравнения (2) интегрируется элементарно. Модуль логарифма раскрывается по разному в зависимости от аргумента. Рассмотрим два случая: 1. $u < A/B$ и 2. $u > A/B$. Случай $u = A/B$ тривиален.

²⁷ В указанной книге фамилия второго автора переведена как «Пёрл», т.е. уравнение – Ферхюльста-Пёрла.

1 случай. Тогда справедливо $\frac{u}{A/B - u} = C_1 e^{At}$. Константу найдем из начального условия $u(0) = u_0$. Разумеется, начальное условие также удовлетворяет условию для u . Тогда после несложных выкладок получаем выражение для переменной u

$$u = \frac{\frac{A}{B} \frac{u_0}{A/B - u_0} e^{At}}{1 + \frac{u_0}{A/B - u_0} e^{At}}$$

Вычислим предел данного решения при $t \rightarrow \infty$. Применяя правило Лопиталья, получаем $\lim_{t \rightarrow \infty} u = \frac{A}{B}$. Знак производной в этих условиях всюду положителен, то есть решение есть возрастающая функция и отношение A/B имеет смысл максимального значения решения, впрочем, никогда не достигаемого.

2 случай. Тогда модуль логарифма раскрывается по другому и после таких же преобразований получаем решение в виде:

$$u = \frac{-\frac{A}{B} \frac{u_0}{u_0 - A/B} e^{At}}{1 - \frac{u_0}{u_0 - A/B} e^{At}}$$

Аналогично применяя правило Лопиталья, получаем $\lim_{t \rightarrow \infty} u = \frac{A}{B}$. Проанализируем знак производной, получим, что производная всюду отрицательна, следовательно, решение убывающее и значение предела имеет смысл минимального значения функции.

Главное упрощение этого уравнения составляет предположение о том, что коэффициенты A и B - константы (не зависят от времени). В некоторых случаях параметрами A и B можно управлять в определенном смысле. Например, вырубая леса, увеличиваем потери биомассы леса и снижаем способность леса к самовосстановлению. Поэтому предположение о постоянстве коэффициентов A и B иногда является слишком большим упрощением, и поэтому данное уравнение не всегда может использоваться для прогнозирования на больших временах, так как необходим пересчет коэффициентов.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4:

Аналитическое решение упрощенной системы уравнений динамики углерода

Рассмотрим систему уравнений, полученную после использования теоремы Тихонова, и рассмотренную выше в статье, т.е. систему (#0), которую мы здесь опять выпишем (чтобы читателю было удобнее следить за выкладками, приводимыми далее):

$$dx_2/d\tau = 0.7863 - 1.9788 \cdot x_2 + 0.0223 \cdot x_3,$$

$$dx_3/d\tau = 1.5937 \cdot x_2 - 0.1563 \cdot x_3, \tag{#0}$$

$$0.2191 \cdot dx_5/d\tau = 0.0182 + 0.1597 \cdot x_2 + 0.022 \cdot x_3,$$

Введем в рассмотрение вектор $\mathbf{X} = (x_2, x_3, 0.2191 \cdot x_5)$. Тогда данную систему уравнений можно представить в виде:

$$d\mathbf{X}/dt = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} + \mathbf{F}$$

Здесь матрица A составлена из коэффициентов при неизвестных, а вектор F содержит свободные члены уравнений. Получаем, что матрица A для указанной системы уравнений имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} -1.9788 & 0.0223 & 0 \\ 1.5937 & -0.1563 & 0 \\ 0.1597 & 0.022 & 0 \end{pmatrix}$$

А вектор-столбец F имеет такой вид:

$$F = \begin{pmatrix} 0.7863 \\ 0 \\ 0.0182 \end{pmatrix}$$

Сам вид матрицы A показывает, что уравнение для переменной x_3 решается отдельно, т.е. надо сначала решить систему из двух уравнений, а затем решить уравнение для переменной x_3 . Как известно, систему из n уравнений с постоянными коэффициентами можно свести к одному уравнению n -го порядка. Покажем это на данном примере. Продифференцировав первое уравнение, имеем:

$$\frac{d^2 x_2}{d\tau^2} = -1.9788 \frac{dx_2}{d\tau} + 0.0223(1.5937x_2 - 0.1563x_3) \quad (2)$$

Переменную x_3 выразим из первого уравнения системы (#0):

$$0.0223x_3 = \frac{dx_2}{dt} - 0.7863 + 1.9788x_2 \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2), получим уравнение второго порядка, содержащее только одну неизвестную функцию x_2 :

$$\frac{d^2 x_2}{d\tau^2} = -1.9788 \frac{dx_2}{d\tau} + 0.03553951 x_2 - 0.1563 \left(\frac{dx_2}{dt} - 0.7863 + 1.9788 x_2 \right)$$

Или, приводя подобные слагаемые и перенося все в левую часть, получаем:

$$\frac{d^2 x_2}{d\tau^2} + 2.1351 \frac{dx_2}{d\tau} + 0.27374693 x_2 = 0.12289869 \quad (4)$$

Как известно из курса теории обыкновенных дифференциальных уравнений, решение этого уравнения есть сумма решений однородного x_2^0 и частного решения x_2^1 , т.е.

$$x_2 = x_2^0 + x_2^1 \quad (5)$$

Исходя из вида правой части уравнения (4) следует, что частное решение надо искать в виде $x_2^1 = A$. Исходя из того, что и первая и вторая производная такого частного решения равны нулю,

следует, что $A = \frac{0.12289869}{0.27374693} = 0.44895$.

Для нахождения решения x_2^0 нужно решить так называемое характеристическое уравнение, которое получается из уравнения (4), если вторую производную заменить на λ^2 , первую производную на λ , вместо неизвестной функции подставить 1, а правую часть приравнять нулю. Получается так, потому что решение ищем в виде экспоненциальной функции с показателем λ . В данном случае характеристическое уравнение имеет вид:

$$\lambda^2 + 2.1351\lambda + 0.27374693 = 0. \quad (6)$$

Корни уравнения (6) вещественны и различны (так как дискриминант больше нуля) и равны:

$$\lambda_1 = -0.137, \quad \lambda_2 = -1.9981$$

Так как корни отрицательны, то точка равновесия будет устойчивой, а решение x_2 будет определяться равенством:

$$x_2 = C_1 e^{\lambda_1 \tau} + C_2 e^{\lambda_2 \tau} + 0.44895.$$

Учитывая выражение (3), найдем аналитическую формулу и для x_3 :

$$0.0223x_3 = C_1 \lambda_1 e^{\lambda_1 \tau} + C_2 \lambda_2 e^{\lambda_2 \tau} - 0.7863 + 1.9788(C_1 e^{\lambda_1 \tau} + C_2 e^{\lambda_2 \tau} + 0.44895)$$

Константы C_1 и C_2 находятся из условий $x_2(0) = 1$, $x_3(0) = 1$. Получаем систему линейных алгебраических уравнений, решение которого легко найти, например, методом Крамера. Получаем следующие значения констант: $C_1 = -0.03716$, $C_2 = 0.588205$. Так как корни характеристического уравнения меньше нуля, то решение достаточно быстро убывает, что видно и на рисунках численного решения.

Осталось найти аналитическую формулу для переменной x_5 . Учитывая вид полученных уравнений и правую часть, решение будем искать в виде:

$$x_5 = A e^{\lambda_1 \tau} + B e^{\lambda_2 \tau} + C \tau + D \quad (7)$$

Коэффициент D находится из условия равенства x_5 нулю в момент времени ноль.

Вычисляя производную, подставляя в третье уравнение системы (1) и приравняв коэффициенты при одинаковых степенях экспоненты и при 1, получаем систему уравнений, решая которую, получили следующие значения коэффициентов: $A = -2.479694$, $B = -0.22476$, $C = 0.924498$, $D = -2.25493$. Таким образом, аналитическая форма получена. Ее анализ показывает, что $x_5(t)$ представляет собой практически прямую с положительным угловым коэффициентом, т.е. $x_5(t)$ – возрастающая функция.

ЛИТЕРАТУРА

- Абросов Н.С., Ковров Б.Г., Черепанов О.А. 1982. Экологические механизмы сосуществования и видовой регуляции. Новосибирск: Наука. 302 с.
- Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. 1994. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высш. шк. 544 с.
- Афанасьев А.П., Дикусар В.В., Милютин А.А., Чуканов С.А. 1990. Необходимое условие в оптимальном управлении. М.: Наука. 320 с.
- Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. 2000. Численные методы. М.: Лаборатория Базовых Знаний. 624 с.
- Бенедикт Р. 2007. Хризантема и меч: модели японской культуры. СПб: Наука. 360 с.
- Бондаренко Н.Ф., Журавлев О.С., Швытов И.А. 1981. Моделирование трансформаций органических веществ в почвах // Галицкий В.В. (ред.). Моделирование биогеоценотических процессов. М.: Наука. 136-141 с.
- Вавилин В.А., Васильев В.Б. 1979. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом. М.: Наука. 119 с.
- Варфоломеев С.Д., Гуревич К.Г. 1999. Биокинетика: Практический курс. М.: ФАИР-ПРЕСС. 720 с.
- Влах И., Сингхал К. 1988. Машинные методы анализа и проектирования электронных схем. М.: Радио и связь. 560 с.
- Вольтерра В. 1976. Математическая теория борьбы за существование. М.: Наука. 288 с.
- Глаголев М.В., Клепцова И.Е. 2009. Эмиссия метана в лесотундре: к созданию «стандартной модели» (Aa2) для Западной Сибири // Вестник ТГПУ. Вып. 3(81). С. 77-81.
- Глаголев М.В., Фастовец И.А. 2012. Апология редуccionизма (редуccionизм – как мировоззренческая основа математического моделирования) // Динамика окружающей среды и глобальные изменения климата. Т. 3. № 2(6). С. 1-24. URL: <http://elibrary.ru/item.asp?id=21194513>
- Гончар-Зайкин П.П., Дынкин Л.Д., Журавлев О.С. 1981. Модель газообмена в системе «микроорганизмы-почва-атмосфера» // Галицкий В.В. (ред.). Моделирование биогеоценотических процессов. М.: Наука. с.142-148.
- Горбань А.Н., Чересиз В.М. 1993. Эффекты критического замедления и медленные релаксации // Прямые и обратные задачи в химической кинетике / Быков В.И. (ответ. ред.). Новосибирск: Наука. С. 107-128.
- Гроссман С., Тернер Дж. 1983. Математика для биологов. М.: Высшая школа. 383 с.

- Джефферс Дж. 1981. Введение в системный анализ: применение в экологии. М.: Мир. 256 с.
- Дорофеев А.Г., Глаголев М.В., Бондаренко Т.Ф., Паников Н.С. 1992. Необычная кинетика роста *Arthrobacter globiformis* и ее объяснение // Микробиология. Т. 61. №1. С. 33-42.
- Дулов В.Г., Белоплицкий В.М., Цибаров В.А. 2005. Математическое моделирование в глобальных проблемах естествознания. Новосибирск: Изд-во СО РАН. 248 с.
- Ильина В.А., Силаев П.К. 2004. Численные методы для физиков. Т. 2. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 118 с.
- Ильин В.А., Позняк Э.Г. 1982. Основы математического анализа, ч.1. М.: Наука.
- Коробов В.И., Очков В.Ф. 2009. Химическая кинетика: введение с Mathcad/Maple/MCS. М.: Горячая линия-Телеком. 384 с.
- Крутько П.Д. 1987. Обратные задачи динамики управляемых систем: Линейные модели. М.: Наука. 304 с.
- Кузнецов В.И., Козлов Н.И., Кирьянов Д.В., Кирьянова Е.Н. 2006. Динамические системы в задачах вычислительной экологии леса. М.: Полибук мультимедиа. 112с.
- Младов А.Г. 1966. Системы дифференциальных уравнений и устойчивость движения по Ляпунову. М.: Высшая школа. 224 с.
- Новиков Е.А. 1997. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука. 195 с.
- Новиков В.А., Новиков Е.А., Юматова Л.А. 1987. Замораживание матрицы Якоби в методе типа Розенброка второго порядка точности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т. 27. N 3. С. 385-390.
- Осипов Ю.С., Васильев Ф.П., Потапов М.М. 1999. Основы метода динамической регуляризации. М.: Изд-во МГУ. 237 с.
- Паников Н.С. 1992. Кинетика роста микроорганизмов: Общие закономерности и экологические приложения. М.: Наука. 311 с.
- Перт С.Д. 1978. Основы культивирования микроорганизмов и клеток. М.: Мир. 331 с.
- Петросян Л.А., Захаров В.В. 1986. Введение в математическую экологию. Л.: Изд-во ЛГУ. 224 с.
- Полужков Р.А., Пых Ю.А., Швытов И.А. 1980. Динамические модели экологических систем. Л.: Гидрометеоздат.
- Ризниченко Г.Ю. 2002. Лекции по математическим моделям в биологии. Часть 1. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 232 с.
- Ризниченко Г.Ю. 2011. Лекции по математическим моделям в биологии. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 560 с.
- Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. 1975. Математическое моделирование в биофизике. М.: Наука. 344 с.
- Самарский А.А., Михайлов А.П. 1997. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Наука. 320 с.
- Свирижев Ю.М. 1976. Вито Вольтерра и современная математическая экология // Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. М.: Наука. С. 245-286.
- Смагин А.В., Садовникова Н.Б., Смагина М.В., Глаголев М.В., Шевченко Е.М., Хайдапова Д.Д., Губер А.К. 2001. Моделирование динамики органического вещества почв. М.: Изд-во МГУ. 120 с.
- Соболь И.М., Статников Р.Б. 2006. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. М.: Дрофа. 175 с.
- Сысуев В.В. 1986. Моделирование процессов в ландшафтно-геохимических системах. М.: Наука. 302 с.
- Толстых М.А., Ибраев Р.А., Володин Е.М., Ушаков К.В., Калмыков В.В., Шляева А.В., Мизяк В.Г., Хабеев Р.Н. 2013. Модели глобальной атмосферы и Мирового океана: алгоритмы и суперкомпьютерные технологии. М.: Наука. 144 с.
- Федоров В.Д., Гильманов Т.Г. 1980. Экология. М.: Изд-во МГУ. 464 с.
- Черноруцкий И.Г. 2011. Методы оптимизации. Компьютерные технологии. СПб.: БХВ-Петербург. 384 с.
- Эндрюс Дж.Ф. 1981. Разработка динамической модели и стратегий управления для процесса анаэробного разложения // Математические модели контроля загрязнения воды / Джеймс А. (ред.). М.: Мир. С. 321-345.
- Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. 1984. Курс химической кинетики. М.: Высшая шк. 463 с.
- Butterbach-Bahl K., Kock M., Willibald G., Hewett B., Buřagiari S., Papen H., Kiese R. 2004. Temporal variations of fluxes of NO, NO₂, N₂O, CO₂, and CH₄ in a tropical rain forest ecosystem // Global Biogeochemical Cycles. V. 18. GB3012. DOI:10.1029/2004GB002243.
- Cai Z., Sawamoto T., Li C., Kang G., Boonjwat J., Mosier A., Wassman R., Tsuruta H. 2003. Field validation of the DNDC model for greenhouse gas emissions in East Asian cropping systems // Global Biogeochemical Cycles. V. 17. No. 4. 1107. DOI:10.1029/2003GB002046
- Cao M., Dent J.B., Heal O.W. 1995. Modeling methane emissions from rice paddies // Global Biogeochemical Cycles. V. 9. No. 2. P. 183-195.
- Cao M., Marshall S., Gregson K. 1996. Global carbon exchange and methane emissions from natural wetlands: Application of a process-based model // Journal of Geophysical Research. V. 101. No. D9. P. 14399-14414.
- Glagolev M.V. 1999. Mathematical modeling of methane emission by peatlands // Proceedings of the conference "Peatlands and wetland forests in application to the problems of stable control of nature". Moscow: GEOS. P.175-177.
- Grant W.D., Long P.E. 1985. Environmental Microbiology // The Handbook of Environmental Chemistry / Ed. by O. Hutzinger. Berlin etc.: Springer-Verlag. V. 1. Part D: The Natural Environment and the Biogeochemical Cycles. P. 125-238.
- Mosier A., Parton W.J., Valentine D.W., Ojima D.S., Schimel D.S., Delgado J.A. 1996. CH₄ and N₂O fluxes in the Colorado shortgrass steppe: 2. Impact of landscape and nitrogen addition // Global Biogeochemical Cycles. V. 10. P. 387-399.
- Panikov N.S., Blagodatsky S.A., Blagodatskaya J.V., Glagolev M.V. 1992. Determination of microbial mineralization activity in soil by modified Wright and Hobbie method // Biology and Fertility of Soils, V. 14. Issue 4. P. 280-287. DOI: 10.1007/BF00395464
- Sabrekov A.F., Kleptsova I.E., Glagolev M.V., Maksyutov Sh.Sh., Machida T. 2011. Methane emission from middle taiga oligotrophic hollows of Western Siberia // Вестник ТГПУ. №. 5. С. 135-143.
- Van der Linden A.M.A., Van Veen J.A., Frissel M.J. 1987. Modeling soil organic matter levels after long-term applications of crop residues, and farmyard and green manures // Plant and Soil. V. 101. P. 21-28.

SIMPLIFICATION OF ECOSYSTEM MODEL ON THE BASIS OF CHARACTERISTIC TIMES ANALYSIS

Glagolev M.V., Lapina L.É.

This work represents one lecture (from the course of lectures "Mathematical modeling of biological processes") adapted for article format. Main attention is paid to the simplification of soil carbon dynamics model. The application of the Tikhonov's theorem (for reduction of the equations number) is shown for this model. Analytical solution of the simplified equations for this model is described in details. The comparison of the numerical solution of full model and the reduced model is given. The McKendrick-Pai's model and Verhulst-Pearl's logistic equation are given (and are investigated analytically). Estimations of the operation number for some typical problems of biological kinetics and mathematical ecology are provided. The estimations showed a sufficient usefulness of simplifications even under the conditions of rapid development of computer technology presently.

Key words: Method of quasistationary concentration, Tikhonov's theorem, the equations with small parameter, McKendrick-Pai's model, Verhulst-Pearl's logistic equation.

Поступила в редакцию: 07.01.2012
Переработанный вариант: 15.12.2012