

MATHEMATICAL MODELING IN SOIL BIOKINETICS*M.V. Glagolev**Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia**Corresponding author: M.V. Glagolev, m_glagolev@mail.ru***Citation:** Glagolev M.V. 2021. Mathematical modeling in soil biokinetics // *Environmental Dynamics and Global Climate Change*. V. 12. No. 2. P. 123-144. DOI: doi.org/10.17816/edgcc90123

This work is a report written at the suggestion of N.S. Panikov in 1984–1985 when the author was a 2nd-year student of the Faculty of Soil Science of the M.V. Lomonosov Moscow State University.

The report provides an example of a mathematical model of soil biokinetics and discusses numerical methods for solving its equations. For the steady state, some useful computer programs are given, and for the non-steady state, references to programs published in the literature are given.

Keywords: biological kinetics, microbiological kinetics, numerical methods.

Данная работа представляет собой доклад¹, написанный по предложению к.б.н. Н.С. Паникова в 1984–1985 гг. в бытность автора студентом 2-го курса факультета почвоведения МГУ им. М.В. Ломоносова.

В докладе приводится пример математической модели почвенной биокинетики и обсуждаются численные методы решения составляющих ее уравнений. Для стационарного случая приводятся некоторые полезные компьютерные программы, а для нестационарного — даны ссылки на программы, опубликованные в литературе.

Ключевые слова: биологическая кинетика, микробиологическая кинетика, численные методы.

¹ Данный доклад был представлен автором на 1-й Выездной (Пушинской) зимней школе факультета почвоведения МГУ, прошедшей в 1985 г. (предупреждая неизбежную путаницу, заметим, что после нескольких лет успешного проведения этой школы, ее работа по не известной нам причине прервалась и возобновилась лишь в 1991 г.; при этом ежегодные школы стали именоваться “Всероссийскими школами «Экология и почвы»”, а их нумерация опять началась с 1-й). Публикуемый ныне текст восстановлен нами по сохранившимся наброскам и черновикам (здесь же заметим, что в связи с вышесказанным одному из издателей пришлось собственноручно переделать все рисунки, используя современные технические средства, ибо в указанных черновиках рисунки были выполнены наскоро от руки, а в процессе доклада выполнялись просто мелом на доске; кроме того **ссылки и список литературы были оформлены нами** по правилам данного журнала — в исходном тексте имелись ссылки только на отечественные и переводные издания). Поскольку, во-первых, объем черновиков был весьма значительным и, во-вторых, нам не известно в точности — что же из них вошло в окончательный вариант доклада, перед нами встал вопрос об отборе материала для данной краткой публикации. В результате, не был включен материал по численному интегрированию эволюционных уравнений в частных производных, поскольку автор рассматривал только самый примитивный явный метод, обладающий малой областью устойчивости (более того, этот материал, фактически, дублирует [Орлов и др., 1987, с. 145-149]). При этом объем статьи стал почти таким, который соответствует правилам журнала для раздела «Обзоры и лекции» (мы посчитали, что доклад на студенческой зимней Школе ближе всего к лекции, и поэтому он должен быть опубликован именно в этом разделе). — *Примечание издателей (к.б.н. Д.В. Ильасова и М.В. Янина).*

Каждый студент должен
что-нибудь открыть.

Проф. Петровской академии А. Ф. Фортунатов¹

ВВЕДЕНИЕ

Биологическая кинетика

Существует несколько определений термина «биологическая кинетика». Рассмотрим наиболее известные из них. Согласно М.Д. Курскому и др. [1977, с. 5]: «биологическая кинетика изучает временные закономерности явлений, протекающих в живой природе». Более общо определяет биокинетику акад. Н.М. Эмануэль [1979, с. 162] — как науку о развитии во времени и о механизме биологических процессов. Аналогичное определение (с небольшой конкретизацией) дает выдающийся советский исследователь Николай Сергеевич Паников [1984, с. 75]: «биологическая кинетика изучает скорости и механизмы метаболических процессов на всех уровнях организации живой материи». В последнем определении, казалось бы, все временные закономерности (из определения Курского и др.), равно как и всё развитие во времени (из определения Эмануэля) сводятся лишь к скоростям.

Но как бы ни был сложен процесс, он определяется в каждое мгновение некоторой скоростью, в общем случае изменяющейся при переходе от одного момента времени к другому. Зависимость скорости процесса от внутренних особенностей и внешних условий должна существенно определять характер его закономерностей [Киперман, 1979, с. 8]. Иначе говоря, любые временные закономерности явлений, развитие во времени любого процесса действительно могут быть выражены в терминах скоростей, поскольку для каждого процесса мы всегда можем рассчитать его скорость.

Таким образом очевидно, что существует, фактически, два основных определения. «Узкое» определение: биологическая кинетика — *наука о скоростях* биологических процессов. «Широкое» определение: биологическая кинетика — *наука о скоростях и механизмах* биологических процессов. Змечу, что это совершенно аналогично соответствующим определениям кинетики химической. Согласно

¹ Цит. по [Орловский, 1980, с. 28]. Поскольку из набросков доклада было видно, что ему предполагалось предпослать некий эпиграф, но самого эпиграфа мы не обнаружили (и даже автор не мог его вспомнить), решено было из списка любимых эпиграфов Михаила Владимировича просто выбрать произвольный подходящий по смыслу. — *Примечание издателей.*

С.Л. Киперману [1979, с. 8], химическая кинетика — это наука о закономерностях скоростей химических процессов. Но некоторые авторы, например академики Н.М. Эмануэль и Д.Г. Кнорре [1984, с. 3], считают необходимым включить сюда и вопрос о механизме реакции. «Официальное» определение, вошедшее в «Советский энциклопедический словарь» [Прохоров, 1983, с. 575]: «кинетика химическая — учение о скоростях и механизмах химических реакций».

Однако распространение кинетики на механизм реакций сделало бы эту науку слишком всеобъемлющей [Киперман, 1979, с. 8]. Фактически, химическая кинетика тогда включила бы в себя едва ли не всю химию вообще. Разве неорганическая химия не изучает механизмы реакций неорганических соединений? Разве органическая химия не изучает механизмы реакций органических соединений? Разве биохимия не изучает механизмы биохимических процессов? Но если механизмы должна изучать кинетика, то что тогда останется на долю биохимии, неорганической и органической химии? И еще можно привести много примеров других разделов химии, которые окажутся «ограблены» кинетикой, если мы будем упорствовать в «широком» определении этой науки.

Все совершенно аналогичное можно было бы сказать и про биологическую кинетику. Но и без многочисленных примеров ясно, что «широкое» определение — слишком широко. Оно заставляет нас включать в биокинетику значительную часть вопросов, традиционно являющихся объектом исследований других областей биологии. С другой стороны, «узкое» направление — слишком узко. Действительно, зачем нужно просто изучать скорости процессов?

Видимо, вполне осознав эту проблему, Киперман [1979, с. 9] предпринимает попытку решить ее (в области кинетики химической): «химическую кинетику можно рассматривать как науку о закономерностях скоростей химических процессов с учетом их механизмов». Попытку эту нельзя признать удачной из-за некоторой неконкретности формулировки. Действительно, что значит «с учетом их механизмов»? Как нужно проводить этот учет? Что вообще под этим подразумевается? А если механизм какого-то процесса еще не известен, то изучение (кинетическое!) закономерностей изменения скорости этого процесса во времени и влияния на нее различных факторов, получается, уже не будет относиться к сфере кинетики? Чтобы не сесть в ту же лужу, пытаюсь дать реалистичное определение биологической кинетики, давайте, прежде всего проанализиру-

ем: что на самом деле делают те, кто относит себя к славному братству биокинетиков.

И вот если мы дадим себе труд проанализировать хотя бы несколько работ специалистов-биокинетиков (независимо от того, какого определения они придерживаются и вообще придерживаются ли хоть какого-нибудь), например, [Bray and White, 1957; Курский и др., 1977; Moshnyakova and Karavaiko, 1979; Panikov et al., 1980; Panikov et al., 1981; Эмануэль и др., 1983; Паников, 1984], то увидим, что в реальности эти исследователи изучают скорости биологических процессов, выводя их из механизмов данных процессов (если таковые известны) и, наоборот, идентифицируют механизмы процессов, интерпретируя данные изучения их скоростей.

С другой стороны, кинетика имеет дело с двумя основными типами задач — прямой и обратной. К прямым относятся задачи, в которых известны порядки и константы скорости отдельных стадий, а требуется найти концентрацию какого-либо из исходных веществ или продуктов реакции в определенный момент времени или найти время, за которое концентрация какого-либо из реагентов или продуктов достигает определенного значения. К обратным — задачи, в которых известны экспериментальные данные, представляющие собой динамику концентраций компонентов реакции при одном или нескольких заданных наборах начальных концентраций, а требуется определить порядок и константы скоростей реакций. Но это лишь в том случае, когда схема процесса известна. Однако чаще всего эта схема является следствием некоторой гипотезы о механизме реакции и нуждается в подтверждении. При этом нередко удовлетворительное описание экспериментальных данных по кинетике сложного процесса удается получить с помощью нескольких разных схем (гипотез о механизме реакций). В этом случае встает вопрос о выборе самой правдоподобной гипотезы [Эмануэль и Кнорре, 1984, с. 190, 235, 237, 243–244]. И весь этот спектр вопросов также относится к обратным кинетическим задачам.

Если же посмотреть на сказанное выше о прямых и обратных кинетических задачах с более общих позиций, то получается, что прямая задача состоит в расчете скорости реакции по известному механизму (известны стадии процесса и константы скоростей для них). А обратная задача в общем случае состоит в идентификации механизма по данным о скоростях (если кривые динамики концентраций определены с достаточно высокой степенью точности, то из них могут быть получены значения скоростей [Эмануэль и Кнорре, 1984, с. 237]). В связи с

этим кажется наиболее естественным принять следующее определение («реалистичное» — основанное на реальном положении дел и, с точки зрения степени общности, находящееся между «узким» и «широким»). **Биологическая кинетика изучает скорости биологических процессов посредством исследования их механизмов (прямая задача) и механизмы этих процессов — посредством исследования их скоростей (обратная задача).**

Используемые сокращения

БГЦ — биогеоценоз;

б/н — без названия;

ДУ — дифференциальное уравнение;

ПоБиК — почвенная биологическая кинетика.

О ПОЧВЕННОЙ БИОКИНЕТИКЕ

Особенности биологической кинетики почв

Кинетические исследования в почвенной микробиологии долгое время (буквально до прошлого — 1984 — года) не получали широкого распространения прежде всего из-за сложности изучаемого объекта — микроразнообразия распределения микроорганизмов, пространственного и временного варьирования условий жизнедеятельности, многообразия видового состава микробных сообществ и тесного взаимодействия микроорганизмов с другими компонентами биогеоценоза (БГЦ) [Паников, 1984, с. 75]. Эта ситуация начала меняться в значительной степени благодаря работам выдающегося советского ученого Николая Сергеевича Паникова, поставившего задачу: продемонстрировать путь преодоления отмеченных трудностей формализованного описания микробиологических процессов в БГЦ, а также дать конкретные рекомендации по составлению кинетических моделей роста микроорганизмов и экспериментальному определению всех необходимых параметров модели. С гениальной ясностью эта задача была почти полностью решена им в [Паников, 1984], что позволяет считать Николая Сергеевича отцом-основателем отечественной почвенной биокинетики (ПоБиК)¹.

Особенность биокинетического подхода как одного из наиболее универсальных методов исследования заключается в неразрывном сочетании эмпирического изучения объекта с

¹ Необходимо сделать оговорку, что хоть и была поставлена цель формализованного описания микробиологических процессов в БГЦ, в реальности она была достигнута не для БГЦ, а лишь в отдельных экосистемах, являющихся составными частями изучаемых БГЦ. — *Примечание издателей.*

Таблица 1. Кинетическая классификация местообитаний микробов в БГЦ (Паников, 1984, с. 76)

Пространственная организация микробной популяции	Поступление субстрата			
	Непрерывное (1)		Периодическое (2)	
	С элиминированием (α)	Без элиминирования (β)	С элиминированием (α)	Без элиминирования (β)
Однородная (a)	1 α a	1 β a	2 α a	2 β a
Неоднородная (b)	1 α b	1 β b	2 α b	2 β b

Таблица 2. Классификация математических моделей ПоБиК

Пространственная организация микробной популяции		Поведение популяции во времени	
		стационарное (S)	нестационарное (D)
Однородная (0)		S0	D0
Неоднородная	1-мерная (1)	S1	D1 ¹
	многомерная (2)	S2	D2

¹ Пример математической модели класса D1 см. в [Орлов и др., 1987, с. 145–149]. — *Примечание издателей.*

математическим моделированием его поведения. Математическая модель, представленная в виде системы дифференциальных и алгебраических уравнений, в предельно сжатой форме отражает постулируемый механизм процесса. Верификацию этого механизма проводят путем сравнения экспериментальных данных с предсказаниями модели. В случае их несовпадения формулируется новая модель (основанная на новых исходных посылах), и процедура сравнения повторяется еще раз [Паников, 1984, с. 75]. Отсюда видно, что в биокинетическом исследовании приходится многократно получать предсказания различных моделей, т.е., с математической точки зрения — многократно решать системы уравнений.

Однако биологические системы чрезвычайно сложны, и предсказание их количественного поведения часто представляет собой трудную задачу. За исключением случая наипростейших биосистем, моделирующие их уравнения чаще всего оказываются слишком сложными для того, чтобы решение можно было найти с помощью карандаша и бумаги; поэтому их приходится решать с помощью вычислительной машины [Garfinkel, 1965]. Таким образом, для действительно беспрепятственного применения кинетических методов исследования в почвенной микробиологии мало научиться описывать микробиологические процессы в БГЦ с помощью математических уравнений роста микроорганизмов. Нужно еще уметь решать эти уравнения, причем решать, как следует из вышесказанного, при помощи ЭВМ, т.е. численно. **И задача настоящей работы состоит в том, чтобы продемонстрировать**

возможность работы с моделями ПоБиК при помощи численных методов.

Классификация моделей биологической кинетики почв

Выдающийся советский почвовед Николай Сергеевич Паников дал чрезвычайно простую и совершенно ясную кинетическую классификацию местообитаний микроорганизмов в почве по принципу сходства кинетических механизмов роста микробных популяций, колонизирующих данное местообитание (табл. 1). Наиболее существенное влияние на рост микроорганизмов оказывают следующие факторы [Паников, 1984, с. 76]:

- характер поступления лимитирующего питательного субстрата, который может быть непрерывным (1) или периодическим (2);
- наличие (α) или отсутствие (β) экзогенных факторов элиминирования растущих организмов (вынос клеток с почвенным раствором, выедание хищниками, фаголизис, активная миграция);
- пространственная организация микробной популяции в данной микро- или мезозоне, которая может быть однородной (a) при отсутствии градиентов концентраций субстрата по пространственной координате, либо неоднородной (b), когда наличие этих градиентов обуславливает закономерное распределение микробной биомассы и отдельных ее элементов по пространству местообитания.

Перечисленные в табл. 1 типы местообитаний отчасти соответствуют тому или иному математическому аппарату, обычно применяе-

тому для построения математических моделей данного местообитания или соответствующей ему лабораторной экспериментальной системы. Но, все же, **для удобства выбора аппарата моделирования** хочу предложить несколько иную классификацию — табл. 2.

Наиболее общие модели — нестационарные многомерная (D2) и одномерная (D1) представляют собой **смешанные¹ задачи для систем уравнений в частных производных** (обычно уравнения — **параболического типа**). Стационарная многомерная модель (S2) — это **граничная задача для системы уравнений в частных производных** (обычно уравнения — **эллиптического типа**). Стационарная одномерная модель (S1) — это опять **граничная задача, но для системы обыкновенных дифференциальных уравнений** (ДУ). Нестационарная однородная (или, как ее еще называют, «нуль-мерная») модель (D0) представляет собой **начальную задачу для системы обыкновенных ДУ**, часто называемую также «задачей Коши». Наконец, стационарная однородная модель (S0) — это **система алгебраических или трансцендентных уравнений**.

Все перечисленные задачи хорошо известны в математике и для их решения существуют эффективные методы, широко представленные в литературе как в виде алгоритмов, так и непосредственно в виде программ для ЭВМ. Ниже я не буду подробно разбирать эти алгоритмы и программы из-за недостатка времени, а лишь кратко перечислю некоторые из них. Основное же время будет уделено обсуждению тех проблем, с которыми, к сожалению, часто приходится сталкиваться при использовании численных методов в ПоБиК.

АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ И ТРАНСЦЕНДЕНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ (СИСТЕМА S0)

Пример системы S0: однородная стационарная модель ризосферы

Выдающийся советский микробиолог Николай Сергеевич Паников дал чрезвычайно простую и совершенно ясную кинетическую модель роста микробной популяции в ризосфере:

$$ds/dt = r_G - \mu \cdot x/Y - m \cdot x, \quad (1)$$

$$dx/dt = \mu \cdot x - E \cdot p \cdot x, \quad (2)$$

¹ Т.е. содержащие и начальные (в начальный момент времени), и граничные (т.е. на пространственной границе) условия [Годунов, 1979, с. 192].

где E — «удельная скорость выедания»²; m — коэффициент поддержания³; p — биомасса хищника; r_G — интенсивность экзоосмоса; s — концентрация субстрата; x — биомасса микроорганизмов; Y — выход биомассы на единицу использованного субстрата; μ — удельная скорость роста микроорганизмов [Паников, 1984, с. 78]; t — время. К сожалению, эта система не является замкнутой, поскольку на 2 уравнения приходится 3 переменные: s , x и p . Замкнуть ее очень легко, записав уравнение динамики биомассы хищника в соответствии со стандартными правилами микробиологической кинетики:

$$dp/dt = Y_{p/x} \cdot E \cdot p \cdot x - a \cdot p, \quad (3)$$

где $Y_{p/x}$ — выход биомассы хищника на единицу использованной биомассы микроорганизмов; a — удельная скорость отмирания хищника.

Обозначим заглавными буквами S , X и P соответствующие величины s , x и p в стационарном состоянии, т.е. когда $ds/dt = dx/dt = dp/dt = 0$. Следовательно, в этом состоянии вместо системы вышеприведенных ДУ будем иметь систему

$$r_G - \mu \cdot X/Y - m \cdot X = 0, \quad (4)$$

$$\mu \cdot X - E \cdot P \cdot X = 0, \quad (5)$$

$$Y_{p/x} \cdot E \cdot P \cdot X - a \cdot P = 0 \quad (6)$$

алгебраических или трансцендентных уравнений (в зависимости от конкретных функций $\mu(S)$, $m(S)$ и $E(X)$ — будут ли они алгебраическими выражениями или трансцендентными функциями). Но чтобы из этой системы действительно можно было бы найти величины S , X и P , следует конкретизировать функции $\mu(S)$, $m(S)$ и $E(X)$.

Моно (Monod J.) в 1942 г. эмпирически установил, что выражение

$$\mu = \mu_m \cdot S/(S + K_S) \quad (7)$$

(где μ_m и K_S — соответственно, максимальная удельная скорость роста и константа насыщения) хорошо соответствует зависимости скорости роста бактерий от концентрации субстрата [Pirt, 1975]. Поскольку бактерии являются пи-

² Представляется, что термин этот не совсем точен (поэтому я поставил его в кавычки, которых в оригинале у Паникова не было). Действительно, согласно второму уравнению, скорость выедания — это $E \cdot p \cdot x$. По аналогии с «удельной скоростью роста» (об этом термине см., например, в [Pirt, 1975]), можно заключить, что удельная скорость выедания должна представлять собой скорость выедания, отнесенную к биомассе выедающего организма. Но если мы разделим скорость выедания на биомассу хищника, то получим не просто E , а $E \cdot x$.

³ См. табл. 3 — *Примечание издателей*.

тательным субстратом для хищников, то будет логичным принять такую же зависимость и для них, поэтому

$$E = E_m / (X + K_X).$$

Из [Паников, 1984, с. 78] ясно следует, что $m = \text{const}$. Этого, конечно, быть не может! Действительно, внесем некоторое количество биомассы $x_0 > 0$ в среду, в которой вообще нет субстрата ($s_0 = 0$). Более того, пусть и поступления новых порций субстрата тоже нет (т.е. положим $r_G = 0$). Тогда в реальности микробы не смогут осуществлять функцию поддержания. А согласно уравнению (1) они расти-то не будут — поскольку $\mu(0)$ — но поддержание будет продолжаться, постоянно выкачивая из среды $m \cdot x$ единиц массы субстрата за каждую единицу времени. Однако, если в среде уже была нулевая концентрация субстрата, и потом она продолжает уменьшаться, то концентрация станет... отрицательной! Полная чепуха!!! Этого абсурда вполне можно избежать, если положить, что m представляет собой такую функцию s , что $\lim m(s) = 0$ при $s \rightarrow 0$. Что же это за функция? Поскольку поддержание (оборот клеточного материала, осмотическая работа для поддержания концентрационных градиентов между клеткой и окружающей средой, подвижность клетки и др. [Pirt, 1975]) осуществляется, в конечном счете, ферментативными процессами, то представляется вполне логичным, что для него будет верна ферментативная кинетика.

Одним из самых фундаментальных уравнений кинетики ферментативных реакций является уравнение Михаэлиса-Ментен [Курский и др., 1977, с. 74], поэтому можно предположить, что

$$m = m_m \cdot S / (S + K_M), \quad (8)$$

где m_m — максимальная удельная скорость трат на поддержание, K_M — соответствующая константа Михаэлиса. Итак, имеем следующую систему из трех уравнений, позволяющую рассчитать концентрацию питательного субстрата, а также биомассы потребляющих его микробов и пожирающих их хищников в ризосфере:

$$r_G - \mu_m \cdot S \cdot X / [(S + K_S) \cdot Y] - m_m \cdot S \cdot X / (S + K_M) = 0, \quad (9)$$

$$\mu_m \cdot S / (S + K_S) - E_m \cdot P / (X + K_X) = 0, \quad (10)$$

$$Y_{p/x} \cdot X \cdot E_m / (X + K_X) - a = 0 \quad (11)$$

Вообще говоря, конкретно такая система может быть решена аналитически. Действительно, из (11) можно выразить X :

$$X = a \cdot K_X / (Y_{p/x} \cdot E_m - a), \quad (12)$$

после чего подставить полученное значение X в (9) и найти оттуда S . А раз мы имеем значения для X и S , то можем получить и P , которое легко найти из (10):

$$P = (\mu_m / E_m) \cdot (X + K_X) \cdot S / (S + K_S). \quad (13)$$

Но, разумеется, аналитическое решение можно получить далеко не для всякой системы.

Например, многие авторы указывали на ограниченность применимости зависимости Моно и предлагали другие выражения. Так, Тисье аппроксимирует удельную скорость роста экспоненциальной функцией

$$\mu = \mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) \quad (14)$$

с некоторой постоянной k [Полуэктов и др., 1980, с. 46]. Если для микробов в ризосфере более адекватной окажется зависимость Тисье, то нам следует для μ использовать (14) вместо (7), а тогда вместо (9) и (10) мы будем иметь, соответственно

$$r_G - \mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) \cdot X / Y - m_m \cdot S \cdot X / (S + K_M) = 0, \quad (15)$$

$$\mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) - E_m \cdot P / (X + K_X) = 0. \quad (16)$$

Теперь мы уже не можем из (15) аналитически выразить S . И это прекрасная возможность для того, чтобы продемонстрировать мощь численных методов.

Но численные методы невозможно применить к уравнениям, записанным в общем виде. Поэтому, прежде чем решать уравнения, нужно задать конкретные значения параметров. Вообще говоря, для каждого вида микроорганизмов и даже для каждого местообитания параметры следует определять экспериментально либо напрямую (если это возможно), либо решая обратную кинетическую задачу. Но для демонстрационного примера ограничимся очень грубыми оценками параметров, которые можно взять из литературы или из здравого смысла. Итак, прежде чем решать систему, состоящую из уравнений (11), (15) и (16), нам надо задать численные значения для a , E_m , k , K_M , K_X , m_m , r_G , Y , $Y_{p/x}$ и μ_m — см. табл. 3. Характерные величины r_G мы не будем обсуждать. Понятно, что в той или иной экосистеме могут встретиться самые разные значения (начиная практически от 0, что будет иметь место в каких-нибудь совсем уж пустынях). Из (15) очевидно, что при $r_G > \mu_m \cdot X / Y + m_m \cdot X = a \cdot K_X \cdot (\mu_m / Y + m_m) / (Y_{p/x} \cdot E_m - a)$ стационарное состояние невозможно потому что ур. (15) не имеет неотрицательного действительного решения. В связи с этим, система ур. (11), (15), (16) будет решаться для всего интервала r_G от 0 до $a \cdot K_X \cdot (\mu_m / Y + m_m) / (Y_{p/x} \cdot E_m - a)$.

Таблица 3. Численные значения параметров для системы уравнений (11), (15), (16).

Параметр	Значение	Обоснование
a	0.0012 1/час	Вавилин и В.Б. Васильев [1979, с. 15] указывали, что для смешанных культур значения a составляют $0.0004 \div 0.002$ 1/час. Правда, в этом случае речь шла о бактериях. Но, вероятно, приблизительно это можно (за неимением лучшего) использовать и для простейших-хищников. Итак, для дальнейших расчетов выбираем среднее значение.
E_m	0.065 ¹ 1/час	Считается, что максимальные показатели удельной скорости роста, например, для парамеций составляют $0.06 \div 0.07$ 1/час [Кокова и Лисовский, 1976, с. 61]. И хотя Валентина Егоровна и Генрих Михайлович неопровержимо доказали, что этот «предел» обусловлен не генетическими факторами, а прежде всего условиями выращивания (аэрация, удаление метаболитов, взвешенный корм позволяют существенно повысить удельную скорость роста), не будем забывать, что идеальные условия вряд ли часто реализуются в природе.
k	0.087 л/мгС	По своему смыслу K_S — это такая концентрация субстрата, при которой достигается удельная скорость роста, равная половине максимальной [Pirt, 1975]. Путем теоретического расчета в [Вавилин и Васильев, 1979, с. 11–13] для глюкозы получено значение $K_S \approx 20$ мг/л (и это укладывается в диапазон экспериментально определенных значений $0.068 \div 25$ мг/л, приведенный в [Pirt, 1975]). При зависимости Тисье половина максимальной удельной скорости роста, как легко получить из (14), должна наблюдаться при $S \approx 0.693/k$, следовательно, $k \approx 0.693/K_S \approx 0.693/(20 \cdot 6 \cdot 12/180)$.
K_M	8 мгС/л	Для K_M оставим значение 20 мг/л (в пересчете на углерод глюкозы это составит 8 мгС/л).
K_X	5.7 мгС/л	Для <i>Tetrahymena</i> при их росте на бактериях в качестве питательного субстрата, С.Р. Curds дает значение константы полунасыщения 12 мг/л [Pirt, 1975]. Согласно [Вавилин и Васильев, 1979, с. 5] в бактериальной клетке около 90% сухого вещества является органическим, а составу органической части приблизительно соответствует эмпирическая формула $C_5H_7O_2N$, поэтому $K_X = 12 \cdot 0.9 \cdot (5 \cdot 12/113)$.
m_m	1.3 1/час	Энергетические затраты на поддержание могут составлять значительную часть общего количества потребленной энергии. Так, при развитии <i>Klebsiella aerogenes</i> на среде с глюкозой в качестве источника энергии при скорости роста 0.1 1/час энергия, израсходованная на поддержание, составляла около 90% всей энергии поглощенного источника. Величина m в этом случае превышала в 3–4 раза ранее найденное значение для того же организма, возможно, из-за того, что в этом случае имелся избыток источника энергии, а ранее опыт проводился с таким его количеством, которое лимитировало рост [Pirt, 1975]. Если считать избыток источника энергии столь значительным, что $m \approx m_m$, то общее потребление субстрата составит $(\mu \cdot x/Y + m_m \cdot x)$, а траты на поддержание — $m_m \cdot x$. Тогда $m_m \cdot x / (0.1 \cdot x / 0.69 + m_m \cdot x) = 0.9$, следовательно $m = 0.1 / [(1/0.9) - 1] \cdot 0.69$.
$Y_{p/x}$	0.34	Для парамеций и блефаризм В.Е. Кокова и Г.М. Лисовский [1976, с. 52, 54] получили КПД биосинтеза на смешанном корме (дрожжи + бактерии) в среднем 37%. Учитывая, что, согласно [Вавилин и Васильев, 1979, с. 5], химическому составу протоплазмы простейших соответствует эмпирическая формула $C_7H_{24}O_3N$, получаем $Y_{p/x} = 0.37 \cdot (7 \cdot 12/170) / (5 \cdot 12/113)$.
Y	0.69	Для бактерий, растущих на глюкозе, Вавилин и Васильев [1979, с. 7–8] с помощью термодинамического расчета ² получили значение $Y = 0.523$ г клеточного органического вещества на 1 г глюкозы или, учитывая содержание углерода в глюкозе и клеточном веществе, $Y = 0.523 \cdot (5 \cdot 12/113) / (6 \cdot 12/180)$.
μ_m	0.14 1/час	Это значение так же путем теоретического расчета Вавилин и Васильев [1979, с. 11–14] получили для бактерий, растущих на глюкозе. Оно несколько меньше, чем максимальные удельные скорости роста, зафиксированные в культурах бактерий (см., например, [Pirt, 1975; Вавилин и Васильев, 1979, с. 14]), но представляется вполне приемлемым с учетом неоптимальности природных условий и иллюстративной цели моих расчетов.

¹ Здесь у автора, очевидно, досадная описка. Из уравнений (6) и (7) ясно видно, что смысл максимальной удельной скорости роста имеет не E_m , а произведение $Y_{p/x} \cdot E_m$ (кстати, в программе, размещенной в табл. П1, параметр E_M описан именно как «МАКСИМАЛЬНЫЙ **МЕТАБОЛИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ** ХИЩНИКА», а не «максимальная **удельная скорость роста** хищника»). Таким образом, раз максимальная удельная скорость роста простейших и экономический коэффициент приняты равными, соответственно, 0.065 1/час и 0.34, то $E_m = 0.065/0.34 \approx 0.19$ 1/час. Впрочем, какой-то принципиальной ошибки тут нет, поскольку принятое автором для E_m значение 0.065 1/час соответствует (при $Y_{p/x} = 0.34$) удельной скорости роста 0.022 1/час, а хищники с параметром такого порядка, безусловно, существуют. — *Примечание издателей.*

² Поскольку [Вавилин и Васильев, 1979] представляет сейчас библиографическую редкость, то считаем нужным отметить, что этот расчет воспроизведен в [Glagolev, 2021]. — *Примечание издателей.*

Численно-аналитический частный метод решения: сведение системы к одному уравнению

Итак, мы собираемся решить (т.е. найти X , S и P) систему уравнений

$$r_G - 0.203 \cdot (1 - e^{-0.087 \cdot S}) \cdot X - 1.3 \cdot S \cdot X / (S + 8) = 0,$$

$$0.14 \cdot (1 - e^{-0.087 \cdot S}) - 0.065 \cdot P / (X + 5.7) = 0,$$

$$0.0221 \cdot X / (X + 5.7) - 0.0012 = 0$$

при разных значениях r_G (от 0 до 0.492 мгС/л/час).

Поступить можно, как минимум, двумя различными способами:

- решать непосредственно систему из 3 уравнений

«в лоб» — использовать какую-либо программу для численного решения систем уравнений;

- свести задачу к численному решению одного уравнения (сначала из последнего уравнения системы аналитически найдем X ; потом подставим его в первое уравнение, которое решим численно, в результате чего найдем S ; и, наконец, подставив полученные значения X и S в среднее уравнение, аналитически найдем из него P).

Множество компьютерных программ разработано для решения как отдельных уравнений, так и их систем (табл. 4). Но первый путь кажется более простым и привлекательным,

Таблица 4. Программы для решения нелинейных алгебраических и трансцендентных уравнений.

Название	Язык	Метод	Литературный источник
<i>Решение уравнения с одной переменной</i>			
HALF	Алгол	Деления отрезка пополам (или бисекции, или половинного деления, или полуинтервалов)	[Кафаров и др., 1972, с. 197-198]
Bisec	Алгол		[Агеев и др., 1975, с. 17-18]
0301	Алгол-60		[Маергойз и Реутова, 1973, с. 5, 8]
	Аналитик		[Маергойз и Реутова, 1973, с. 5-7]
б/н	Аналитик		[Мешалкина, 1980, с. 80-81]
BINBIS	Фортран-10	[Johnson, 1980, p. 154-158]	
б/н	Алгол	Итераций (для уравнения $f(y) = y$)	[Гутер и Резниковский, 1971, с. 72]
Root			[Агеев и др., 1975, с. 58-60]
Zeros	Алгол	Мюллера	[Агеев и др., 1975, с. 55-58]
Muller	Алгол		[Агеев и др., 1981, с. 99-111]
0302	Алгол-60	Хорд (или пропорциональных частей)	[Маергойз и Реутова, 1973а, с. 9, 12]
	Аналитик		[Маергойз и Реутова, 1973а, с. 9-11]
б/н	Алгол	Хорд и касательных	[Гутер и Резниковский, 1971, с. 69-70]
0304	Алгол-60	Итерационный процесс Эйткена-Стеффенсена с ускоренной сходимостью	[Маергойз и Реутова, 1973с, с. 17, 19-20]
	Аналитик		[Маергойз и Реутова, 1973с, с. 17-19]
б/н	Фортран	Ньютона (или Ньютона-Рафсона)	[Shoup, 1979]
NEWTON	Фортран-10		[Johnson, 1980, p. 169-172]
ZEROIN	ANSI Standard Fortran	Брента	[Forsythe et al., 1977]
0303	Алгол-60	М.Л. Рыбакова	[Маергойз и Реутова, 1973b, с. 13, 16]
	Аналитик		[Маергойз и Реутова, 1973b, с. 13-15]
<i>Решение систем уравнений</i>			
0311	Алгол-60	Простой итерации	[Маергойз и Реутова, 1973d, с. 66-67, 70]
	Аналитик		[Маергойз и Реутова, 1973d, с. 66-69]
0312	Алгол-60	Монте-Карло	[Маергойз, 1973, с. 71-74, 84-88]
	Аналитик		[Маергойз, 1973, с. 71-84]
FALL1, FALL2	Фортран	Градиента	[Кукебаев, 1979]

поскольку не надо уметь выполнять никаких аналитических преобразований, а достаточно просто записать уравнения исходной системы по правилам того или иного языка программирования. Однако проблема численного решения уравнений (и особенно их систем!) состоит в том, что нужно задать либо достаточно хорошее приближение к решению, либо (в случае решения одного уравнения методом половинного деления) указать границы, в которых оно находится. Поскольку нет уверенности, что удастся угадать хорошее начальное приближение для исходной системы (т.е. угадать такие значения X_0 , S_0 и P_0 , которые в некотором смысле недалеко отстоят от решения — от тройки чисел X , S и P), то сначала реализуем второй путь.

Выше было показано, что стационарное значение X можно найти по формуле (12): $X = 0.0012 \cdot 5.7 / (0.34 \cdot 0.065 - 0.0012) = 0.327$ мгС/л. Проверим найденное значение, подставив его в последнее уравнение системы: $0.0221 \cdot 0.327 / (0.327 + 5.7) - 0.0012 \approx -9 \cdot 10^{-7}$, т.е. получаем практически 0, а это значит, что $X = 0.327$ мгС/л действительно найдено верно. Теперь обратимся к первому уравнению системы.

Для определения корня уравнения можно использовать итеративный метод бисекции. При этом необходимо знать значения аргумента S_1 и S_2 , охватывающие корень S : $S_1 \leq S \leq S_2$ [Johnson, 1980, p. 152]. Такое требование (по крайней мере в случае нашего примера) кажется более простым, чем необходимость указать некое «хорошее» начальное приближение к корню. Действительно, предположительное значение S_1 обнаруживается сразу же — просто исходя из физического смысла концентрации: она не может быть отрицательной, следовательно $S_1 = 0$. Чтобы задать S_2 , введем обозначение $\alpha = \mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) \cdot X / Y$ и с использованием α перепишем (15):

$$r_G - \alpha = m_m \cdot S \cdot X / (S + K_M).$$

Найдем отсюда S :

$$S = (r_G - \alpha) \cdot K_M / (m_m \cdot X - r_G + \alpha).$$

Если рассматривать S как функцию α , то эта функция будет убывающей: чем α меньше — тем S больше. Следовательно, в качестве S_2 мы можем взять S при наименьшем — нулевом — значении α ¹:

¹ К сожалению, такой метод выбора S_2 будет работать только при $r_G < m_m \cdot X$, т.е. в нашем примере при $r_G < 0.425$, тогда как стационарные состояния возможны вплоть до $r_G = 0.492$ мгС/л/час. Поскольку исправить ситуацию можно многими простейшими путями, то за неимением места я не буду на этом останавливаться (в конце концов, используемая далее программа ZEROIN просто выдает вместо корня значение S_2 если пользователь так неудачно задал S_2 , что $S_2 < S$).

$$S_2 = r_G \cdot K_M / (m_m \cdot X - r_G) > \\ > (r_G - \alpha) \cdot K_M / (m_m \cdot X - r_G + \alpha) = S.$$

Такой выбор S_1 и S_2 легко проверить для любого частного случая. Пусть, например, мы хотим найти решение уравнения (15) при $r_G = 0.2$ мгС/л/час. Тогда $S_2 = 0.2 \cdot 8 / (1.3 \cdot 0.327 - 0.2) \approx 7.11$ мгС/л. Если подставить S_1 в (15), то равенство не будет соблюдаться, т.к. в правой части имеем 0.2, а $0.2 \neq 0$. Но если подставить $S_2 = 7.11$, то равенство опять не будет соблюдаться, однако теперь в правой части имеем $0.2 - 0.14 \cdot (1 - e^{-0.087 \cdot 7.11}) \cdot 0.327 / 0.69 - 1.3 \cdot 7.11 \cdot 0.327 / (7.11 + 8) \approx -0.031$. Знак числа поменялся! Очевидно, что корень действительно заключен где-то между S_1 и S_2 : значение S_1 оказалось слишком мало и поэтому правая часть (15) при подстановке в нее S_1 не упала до нуля, а осталась на уровне 0.2, но S_2 — слишком велико и поэтому правая часть (15) упала ниже нуля.

Теперь, когда мы имеем интервал, в котором заключен корень уравнения (15), его можно легко найти при помощи одной из программ, реализующей метод бисекции или метод Брента² (табл. 4). Вычислив таким образом S , после этого можно очень просто найти P из (16):

$$P = \mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) \cdot (X + K_X) / E_m \quad (17)$$

(кстати, из этой формулы следует, что P ограничено значением $\mu_m \cdot (X + K_X) / E_m \approx 0.14 \cdot 6.027 / 0.065 \approx 13$). Программа, реализующая описанный алгоритм, помещена ниже в табл. П1 (см. ПРИЛОЖЕНИЕ). Решение системы, состоящей из уравнений (11), (15) и (16), графически представлено на рис. 1.

² Алгоритм бисекции абсолютно застрахован от неудачи, но довольно медлителен. Если функция $f(S)$, нуль которой ищется, достаточно гладкая (имеет одну или две непрерывные производные), то часто есть возможность значительно сократить количество вычислений функции по сравнению с методом бисекции. Один из лучших имеющихся алгоритмов — ZEROIN, изобретенный в 1960-х гг. в Математическом центре Амстердама (Ван Вейнгарден, Деккер и др.) и затем улучшенный Брентом (1973). Он сочетает безотказность бисекции с асимптотической скоростью метода секущих в случае гладких функций (гарантированно не может быть много медленнее бисекции, но быстрее ее, когда f является гладкой). Добавочная скорость очень полезна, если вычисление $f(S)$ требует много времени [Forsythe et al., 1977, p. 173, 177]. Если отвлечься от рассматриваемого довольно простого «ризосферного» примера, то кажется вполне реалистичным ожидать, что современные модели ПоБиК часто будут порождать весьма сложные уравнения (т.е. весьма сложные функции f , на вычисление которых, естественно, будет уходить много машинного времени).

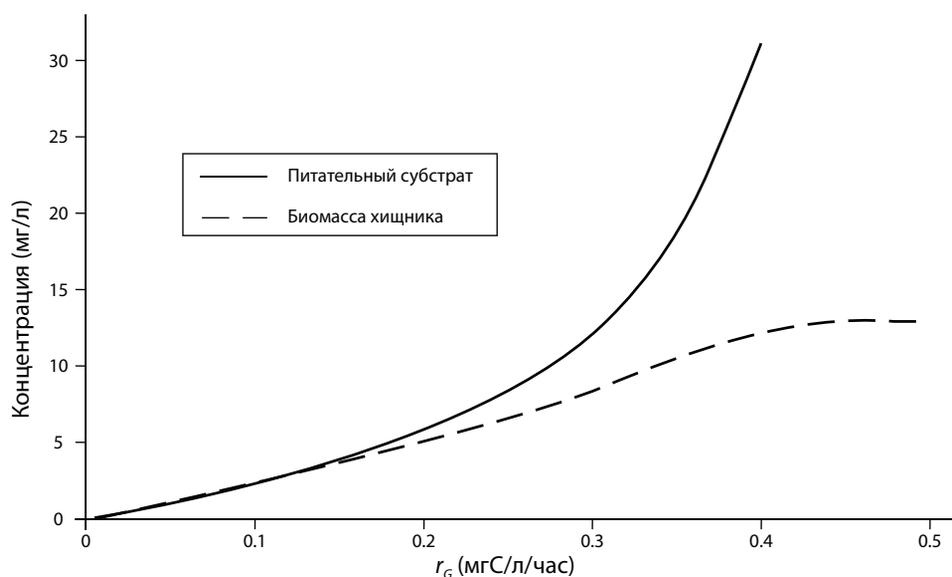


Рис. 1. Стационарная однородная модель ризосферы: решение уравнений (11), (15) и (16). Биомасса микробов не приводится, т.к. она, согласно данной модели, не зависит от r_G (при значениях параметров, приведенных в табл. 3, $X = 0.327$ мгС/л).

Способ Ньютона-Рафсона для нелинейных систем уравнений

На практике в классических моделях микробиологической кинетики довольно часто удается вычленить одно уравнение, аналитически неразрешимое относительно единственной переменной, которое можно решить численно, после чего уже удастся решить (аналитически) и всю систему, как это было показано в предыдущем разделе на примере модели ризосферы. Но понятно: нет гарантии, что так можно будет поступить всегда. Более того, интуитивно ясно, что для сложных моделей реальных природных систем, скорее всего, это не пройдет и нам нужен какой-то универсальный способ.

Обозначая через \mathbf{x} вектор-столбец $(x_1, \dots, x_n)^T$, можно записать уравнения в виде $f_1(\mathbf{x}) = 0$, $f_2(\mathbf{x}) = 0$, ..., $f_n(\mathbf{x}) = 0$. Или, вводя для вектора-столбца функций $(f_1, \dots, f_n)^T$, обозначение \mathbf{f} , можем записать всю систему в компактной форме

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0. \quad (18)$$

Если могут быть вычислены все частные производные функций f_i по переменным x_j , то можно применить метод Ньютона. Пусть $J(\mathbf{x})$ обозначает матрицу Якоби; ее элемент $J_{i,j}$ есть значение производной $\partial f_i / \partial x_j$ в точке \mathbf{x} . Метод Ньютона начинает с произвольного \mathbf{x}_0 . Далее, функцию \mathbf{f} линеаризуют в точке \mathbf{x}_0 , разлагая ее в ряд Тэйлора и удерживая лишь члены нулевой и первой степени [Forsythe et al., 1977]:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) + J(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Обозначая вектор поправок к решению $\Delta = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ и учитывая, что должно выполняться

(18), получаем для Δ систему линейных алгебраических уравнений: $J(\mathbf{x}_0) \cdot \Delta = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$.

Более точные, чем \mathbf{x}_0 , значения корней: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \Delta$. Дальнейшие поправки можно получить тем же путем, отправляясь от точки \mathbf{x}_1 [Гутер и Резниковский, 1971, с. 104]. В общем случае, имея \mathbf{x}_k , находят $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \Delta_{k+1}$, получая поправку Δ_{k+1} решением линейной системы $J(\mathbf{x}_k) \cdot \Delta_{k+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ [Forsythe et al., 1977]. Понятно, что этот процесс можно продолжать бесконечно, поэтому возникает естественный вопрос: когда следует остановиться? Когда можно считать, что решение найдено (и дальнейшее его уточнение бессмысленно) или, напротив, что найти решение не получается и поэтому дальнейшее применение вышеописанного алгоритма все равно не имеет смысла?

А.И. Кукебаев [1979, с. 320-322] заканчивает вычисления когда скалярное произведение $\mathbf{f} \cdot \mathbf{f} < \text{EPS1}$ (решение найдено), либо когда $k > K$, где K — допустимое число итераций (решение не может быть найдено). К. Джонсон [Johnson, 1980, р. 237] принимает $K = 20$. Я реализовал вышеописанный метод Ньютона-Рафсона с условиями окончания вычислительного процесса по Кукебаеву-Джонсону в виде подпрограммы NEWRAF (и ряда вспомогательных подпрограмм для нее — см. табл. П2 и П3 в Приложении). В программе NERA (табл. П2) данный метод применен к расчету стационарной однородной модели ризосферы, содержащей уравнения (11), (15) и (16).

На сходимость метода Ньютона существенно влияет выбор начального приближения [Бененсон и др., 1981, с. 23]. К счастью,

Таблица 5. Итерации метода Ньютона-Рафсона для системы уравнений (11), (15) и (16) при начальном приближении $S=0$, $X=0.327$ и $P=0$.

Итерация	Значения переменных			Итерация	Значения переменных		
	S	X	P		S	X	P
1	3.395	0.327	3.834	3	5.557	0.327	4.979
2	5.239	0.327	4.870	4	5.557	0.327	4.979

обычно из каких-то простых физических или (в нашем случае) биологических соображений удается предположить «достаточно хорошие» начальные приближения, т.е. такие, которые обеспечат сходимость метода. В рассматриваемом примере не просто хорошее, а, можно сказать, прекрасное приближение к X находим по формуле (12). Начальные приближения к S и P очень легко получить в частном случае $r_G \rightarrow 0$, исходя из биологического смысла. Если в систему не подается субстрат (при $r_G = 0$), то его там и не может быть в стационарном состоянии, следовательно $S=0$. Имея X и S , находим по формуле (17) начальное приближение к P : оно, как и S , оказывается нулевым. Предположим, мы хотим найти решение системы уравнения (11), (15) и (16) при $r_G = 0.2$ мгС/л/час. Исходя из выбранного начального приближения ($S=0$, $X=0.327$ и $P=0$), NERA находит решение ($S=5.557$, $X=0.327$ и $P=4.979$) всего за 4 итерации (табл. 5).

Решение проблемы выбора начального приближения в общем случае: метод продолжения

К сожалению, ясно: нет гарантии, что всегда легко можно найти хорошее начальное приближение. Более того, интуитивно понятно, что чем сложнее будут модели реальных природных систем, тем труднее будет определить начальное приближение, обеспечивающее сходимость. Наигранное бодрчество Форсайта и др. [Forsythe et al., 1977]: «На практике можно подчас, итерируя с мужеством и оптимизмом, найти корень...», вряд ли может удовлетворить советских ученых, не привыкших полагаться на «авось». Очевидно, что необходим какой-то универсальный способ. И он существует!¹

¹ Для того чтобы, стартуя с плохого приближения, излагаемый далее «метод продолжения» мог бы найти решение, необходимо выполнение некоторых условий, накладываемых на функции, задающие уравнения. К сожалению, автор не рассматривает эти условия и даже не упоминает об их существовании, что создает иллюзию абсолютной универсальности метода продолжения. И хотя условия эти не слишком ограничительны, строго говоря, **универсальным методом продолжения**, все же, **не является**. Заинтересованный читатель может познако-

Область сходимости можно расширить, используя метод продолжения. Суть его состоит в следующем. Вместо одного отображения $f(x)$ вводится целое семейство их:

$$H(x, T) = T \cdot f(x) + F_0(x, T) \cdot (1 - T),$$

где $T \in [0, 1]$, а функция F_0 при $T=0$ должна быть близка к линейной относительно x . Таким образом, $H(x, 0) = F_0(x, 0)$, $H(x, 1) = f(x)$ [Бененсон и др., 1981, с. 23]. Итак, в методе продолжения вместо задачи $f(x)=0$ решается задача $H(x, T)=0$, т.е. $T \cdot f(x) + F_0(x, T) \cdot (1 - T) = 0$. Пусть мы имеем произвольное начальное приближение x_0 , такое, что метод Ньютона-Рафсона, используя это приближение, не может найти решение. Если положить $T=0$, то задачу $0 \cdot f(x_1) + F_0(x_1, 0) \cdot (1 - 0) = F_0(x_1, 0) = 0$ можно решить, поскольку функция F_0 выбрана так, что при $T=0$ она близка к линейной (более того, ничто не мешает нам для гарантированной сходимости выбрать ее не просто близкой к линейной, а в точности линейной). Теперь, используя x_1 в качестве начального приближения, решим задачу $T_1 \cdot f(x_2) + F_0(x_2, T_1) \cdot (1 - T_1) = 0$ для максимально большого значения $T_1 \leq 1$, для которого такую задачу удастся решить. После этого, используя найденное значение x_2 в качестве начального приближения, решим задачу $T_2 \cdot f(x_3) + F_0(x_3, T_2) \cdot (1 - T_2) = 0$ для максимально большого значения T_2 из интервала $(T_1, 1]$. Этот процесс следует продолжать до тех пор, пока наконец мы получим при $T=1$ решение задачи $1 \cdot f(x) + F_0(x, 1) \cdot (1 - 1) = f(x) = 0$. Рассмотрим описанный алгоритм на примере.

Возьмем для нашей системы, состоящей из уравнений (11), (15) и (16), очень плохое начальное приближение: $S_0 = 10$, $X_0 = 1.5$ и $P_0 = 0$. Используя такое приближение, программа NERA не сможет найти решение указанных уравнений. Тогда, в соответствии с методом продолжения, изменим задачу и будем рассматривать, например, такие уравнения:

$$T \cdot [r_G - \mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) \cdot X/Y - m_m \cdot S \cdot X/(S + K_M)] + (S - 10) \cdot (1 - T) = 0,$$

миться с вышеупомянутыми условиями (и вообще со многими тонкостями) данного метода, например, по превосходной книге [Шалашилин и Кузнецов, 1999]. — *Примечание издателей.*

$$T \cdot [\mu_m \cdot (1 - e^{-k \cdot S}) - E_m \cdot P / (X + K_X)] + (X - 1.5) \cdot (1 - T) = 0, \quad (19)$$

$$T \cdot [Y_{p/x} \cdot X \cdot E_m / (X + K_X) - a] + P \cdot (1 - T) = 0.$$

Очевидно, что при $T = 1$, эти уравнения превращаются, соответственно, в (15), (16) и (11), а при $T = 0$ — в простейшую линейную систему

$$S - 10 = 0, \quad X - 1.5 = 0, \quad P = 0. \quad (20)$$

Последняя специально была придумана так, чтобы ее решением являлось наше неудачное начальное приближение ($S_0 = 10$, $X_0 = 1.5$ и $P_0 = 0$). Итак, это начальное приближение позволяет получить решение при $T = 0$. Попробуем теперь получить решение системы (19) при $T = 0.5$, используя решение системы (20) в качестве начального приближения. Всего лишь за 3 итерации получаем решение: $S_1 = 11.043$, $X_1 = 1.414$ и $P_1 = -0.003$. К сожалению, если попытаться получить решение исходной задачи (при $T = 1$), используя S_1 , X_1 и P_1 в качестве начального приближения, то опять ничего не получится. Не страшно! Попробуем (используя то же начальное приближение S_1 , X_1 и P_1) найти решение системы (19) при $T = 0.75$.¹ Опять буквально за 3 итерации получаем решение: $S_2 = 12.822$, $X_2 = 1.217$ и $P_2 = -0.008$. Снова попытаемся получить решение исходной задачи (т.е. при $T = 1$), используя теперь уже S_2 , X_2 и P_2 в качестве начального приближения. И здесь нас ожидает закономерный успех — используя S_2 , X_2 и P_2 , NEWRAF за 8 итераций находит решение уравнений (15), (16), (11)!

ЗАДАЧА КОШИ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ (СИСТЕМА D0)

Пример системы D0: однородная нестационарная модель ризосферы

Фактически, прежде чем получить однородную стационарную модель ризосферы, рассматривавшуюся выше, мы уже имели ее нестационарную модель — систему, включающую в себя уравнения (1), (2) и (3). В качестве примера далее рассматриваются расчеты по этой модели, в которой μ , m и E приняты в виде (14), (8) и (7), соответственно², а численные значения параметров взяты из табл. 3. С математической

¹ Почему при $T = 0.75$? Потому что при $T = 0.5$ мы смогли найти решение, а при $T = 1$ — нет, хотя нам нужно именно решение при $T = 1$. Двигаясь от $T = 0.5$ к нашей цели ($T = 1$), естественно попробовать найти решение в середине этого интервала, т.е. при $T = 0.75$.

² Разумеется, в эти формулы вместо стационарных концентраций X и S следует теперь подставлять нестационарные x и s , соответственно.

точки зрения данная модель представляет собой систему обыкновенных ДУ. Если в начальный момент времени ($t = 0$) мы зададим значения $s(0)$, $x(0)$ и $p(0)$, то сможем рассчитать дальнейшую динамику — $s(t)$, $x(t)$ и $p(t)$. Это — задача Коши. Для ее численного решения в литературе имеется множество компьютерных программ — см. табл. 6.

Проблема жесткости

Проблемы, с которыми сталкивается применение вычислительных методов в задачах эволюции биологических систем, сообществ, популяций (и уравнения, на которых оно основано), встречаются весьма часто и при анализе широкого круга задач химической кинетики, эволюции физических систем и т.п.³. Особенность таких систем состоит в том, что временные характеристики различных переменных существенно отличаются друг от друга: для кинетических систем такого типа характерно наличие быстро и медленно меняющихся переменных [Полак и др., 1984, с. 3, 130].

Для динамических систем можно оценить постоянные времени, которые определяют длительность переходных процессов и устойчивость алгоритмов численного интегрирования [Бененсон и др., 1981, с. 121]. Наличие быстрой и медленной подсистем определяет трудности, возникающие при численном решении задачи [Полак и др., 1984, с. 130]. Так, полное время переходного процесса в системе определяется наибольшей постоянной времени (τ_{\max}). С другой стороны, устойчивость наиболее распространенных явных методов интегрирования (Эйлера, Рунге-Кутты различных порядков и др.) нарушается уже при некотором превышении шагом интегрирования величины, имеющей порядок наименьшей постоянной времени (τ_{\min}) [Бененсон и др., 1981, с. 121]. Постоянная времени для решения ДУ — это время, необходимое для уменьшения значений решения в e раз. Например, уравнение $dy/dt = -\lambda \cdot y$ имеет решение $y(t) = C \cdot e^{-\lambda \cdot t}$. Если $\lambda > 0$, то y уменьшится за время $1/\lambda$ в e раз⁴ [Forsythe et al., 1977]. Для линейных систем можно оценить собственные значения матрицы системы ДУ и соответствующие им постоянные времени. Для нелинейной системы исследуется

³ Это позволяет надеяться на то, что в ПоБиК нам не придется каждый раз «изобретать велосипед», а можно будет просто освоить тот, на котором давно «катаются» физики и химики.

⁴ Форсайт и др. утверждают, что y уменьшится в $1/e$ раз, но «уменьшение в $1/e$ раз означает, что y *возрастет в e раз*. Это, конечно, грубая ошибка (впрочем, мы давно уже привыкли, что для буржуазных ученых ошибки вполне естественны).

Таблица 6. Программы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Название	Код*	Язык	Метод	Литературный источник
0611	МУп3	Аналитик	Нумерова	[Дрючина и Геец, 1973, с. 161–164]
		Алгол-60		[Дрючина и Геец, 1973, с. 161, 163–165]
0610	МУп2	Аналитик	Милна с разгоном по методу Рунге-Кутта	[Дрючина, 1973г, с. 153–154, 157–160]
				[Дрючина, 1973г, с. 153–158]
MLNRK4	MSп2	Фортран-IV		[Белявский и др., 1979, с. 372–374]
MIRK2S				[Белявский и др., 1979, с. 372–377]
Euler	МУп1	Алгол	Эйлера	[Гутер и Резниковский, 1971, с. 260]
YmE			Уточненный метод Эйлера	[Гутер и Резниковский, 1971, с. 261]
0602		Аналитик	Эйлера-Коши с итерациями	[Дрючина, 1973, с. 72–75]
		Алгол-60		[Дрючина, 1973, с. 72, 76–77]
RK		Алгол	Рунге-Кутта 4-го порядка	[Гутер и Резниковский, 1971, с. 262]
0608		Алгол-60	Адамса	[Дрючина, 1973е, с. 133–134, 137–139]
		Аналитик		[Дрючина, 1973е, с. 133–138]
PRECOR	MUa1	Фортран-10	Прогноза и коррекции	[Johnson, 1980, p. 359–363]
EULER			Эйлера	[Johnson, 1980, p. 348–352]
0601		Аналитик	Эйлера-Коши с итерациями	[Дрючина и Левченко, 1973, с. 65–69]
		Алгол-60		[Дрючина и Левченко, 1973, с. 65, 69–71]
0604		Аналитик	Рунге-Кутта 4-го порядка	[Дрючина, 1973а, с. 88, 92–95]
				[Дрючина, 1973а, с. 88–92]
RUNKUT		Фортран-10		[Johnson, 1980, p. 353–358]
0606		Аналитик	Кутта-Мерсона	[Дрючина, 1973с, с. 109–113]
		Алгол-60		[Дрючина, 1973с, с. 109–110, 113–116]
РУКУ	MSп1**		Рунге-Кутта 4-го порядка	[Емельянов, 1983, с. 72–74]
0609	MSп1		Адамса	[Дрючина, 1973f, с. 140–141, 147–152]
		Аналитик		[Дрючина, 1973f, с. 140–148]
0603	MSa1	Алгол-60	Эйлера-Коши с итерациями	[Левченко и Дрючина, 1973, с. 78, 83–87]
		Аналитик		[Левченко и Дрючина, 1973, с. 78–84]
0605		Алгол-60	Рунге-Кутта 4-го порядка	[Дрючина, 1973b, с. 96–105]
				[Дрючина, 1973b, с. 96–97, 104–108]
RUNGE		Фортран-10		[Johnson, 1980, p. 367–373]
P502		Алгол		[Кафаров и др., 1972, с. 375–379]
Runge				[Агеев и др., 1975, с. 23–29]
0607		Алгол-60	Кутта-Мерсона	[Дрючина, 1973d, с. 117–119, 125–132]
		Аналитик		[Дрючина, 1973d, с. 109–127]
RKF45		ANSI Standard Fortran	Рунге-Кутта-Фельберга	[Forsythe et al., 1977]
STIFFC	JSa1	Фортран	Гира	[Полак и др., 1984, с. 237–252]

Примечания.

*Используются следующие значения кодов: «U» или «S» — программа предназначена для решения одного уравнения или системы; «a» или «п» — шаг интегрирования автоматический или постоянный; «1» или «2», а также «3» — соответственно, уравнения 1-го или 2-го порядка, разрешенные относительно старшей производной, а также уравнение специального вида $d^2y/dx^2 = f(x) \cdot y$; «Ж» или «М» — программа, соответственно, предназначена или не предназначена для интегрирования жестких уравнений.

**Для этой программы три легко реализуемых алгоритма выбора шага приведены в [Емельянов, 1983, с. 81–82].

матрица Якоби на каждом шаге интегрирования [Бененсон и др., 1981, с. 121], т.е. получается, что в нелинейном случае «постоянные времени» могут изменяться с течением времени. Очевидно, что для нелинейной системы ДУ определение «постоянных времени» уже не слишком просто. Но, вероятно, грубая их оценка¹ может базироваться всего лишь на анализе значений коэффициентов уравнений. Для рассматриваемого нами примера из табл. 3 мы имеем 4 константы с размерностью «1/час»: $a = 0.0012$, $E_m = 0.065$, $m_m = 1.3$ и $\mu_m = 0.14$. Соответственно, $\tau_{\max} \sim 1/a \approx 833.3$ часа, а $\tau_{\min} \sim 1/m_m \approx 0.8$ часа. Это означает, что самый медленный переходный процесс (отмирание хищников) имеет характерное время порядка многих сотен часов (и, следовательно, чтобы увидеть все возможные переходные процессы в нашей модели, требуется интегрировать ее на интервале многих сотен часов (а, учитывая приближенность нашего подхода к оценке постоянных времени, лучше закладывать на тысячу часов или даже более)).

Системы дифференциальных уравнений, описывающие поведение как быстрой, так и медленной подсистемы, называются жесткими. Трудности решения жестких задач состоят в том, что шаг интегрирования согласуется с характерным временем быстрого процесса, в то время как характерное время медленного процесса много больше и необходимое число шагов интегрирования будет сравнимо с [Полак и др., 1984, с. 130–131] τ_{\max}/τ_{\min} .

Большинство стандартных методов не приспособлено для решения жестких уравнений. К счастью, были изобретены специальные методы, оказавшиеся весьма эффективными [Forsythe et al., 1977]. Для того, чтобы выбор шага определялся лишь соображениями точности, при решении жестких задач Коши используются так называемые А-устойчивые методы [Полак и др., 1984, с. 131].

К сожалению, требованию А-устойчивости отвечают далеко не все методы и это требование накладывает серьезные ограничения на схему интегрирования. Далквистом было показано, что явный линейный многшаговый метод не может быть А-устойчивым, а порядок неявного А-устойчивого метода не превышает 2

¹ Считаю нужным еще раз подчеркнуть, что это — очень грубое приближение. Л.С. Полак и др. [1984] справедливо указывают (для случая химической кинетики), что константа скорости сама по себе не является оценкой характерного времени би- и тримолекулярных процессов. Т.е., если говорить более обще: кинетические параметры ДУ не являются оценками характерных времен каких-либо процессов, если эти параметры стоят при нелинейных членах уравнений.

[Полак и др., 1984, с. 132]. Как известно, неявные методы интегрирования в общем случае требуют на каждом шаге решить нелинейную систему уравнений, т.е. являются обычно более трудоемкими при реализации, чем традиционные явные методы интегрирования [Бененсон и др., 1981, с. 122]. Однако на практике чаще используются неявные разностные методы, ибо они в большей степени обладают свойством устойчивости, что позволяет выбирать больший по сравнению с явными схемами шаг интегрирования [Полак и др., 1984, с. 135]. Порождаемые неявными разностными методами системы нелинейных алгебраических или трансцендентных уравнений легко решаются программами типа NEWRAF (приведенной в табл. П2 Приложения). Простота использования таких программ и их высокая эффективность могут ввести неопытного вычислителя в искушение самостоятельно запрограммировать какой-либо несложный неявный метод дискретизации дифференциальных уравнений.

Вероятно, простейшим из них является так называемый *обратный метод Эйлера*, выражаемый формулой $y_{n+1} = y_n + h \cdot f(y_{n+1}, t_{n+1})$ [Forsythe et al., 1977] для решения уравнения $dy/dt = f(y, t)$ (здесь y_{n+1} — искомое значение решения при значении независимой переменной t_{n+1} ; y_n — известное значение решения при значении независимой переменной t_n ; h — шаг интегрирования: $h = t_{n+1} - t_n$). Но поскольку кроме относительно легко решаемой задачи поиска корней системы нелинейных уравнений, в теории численного решения систем ДУ есть еще много различных «подводных камней», то лучше использовать разработанное профессионалами программное обеспечение (тем более, что оно легко доступно).

В последние годы наблюдается особый интерес к так называемым А(α)-устойчивым неявным методам интегрирования, у которых максимальное значение допустимого шага так же определяется не наименьшей постоянной времени, а степенью гладкости процессов и значениями некоторых параметров метода интегрирования (порядком метода, точностью и т.п.) [Бененсон и др., 1981, с. 122]. О.В. Widlund показал, что можно сконструировать неявные многшаговые методы 3-го и 4-го порядков, обладающие свойствами А(α)-устойчивости. Однако может возникнуть ситуация, когда в решении появляются резко растущие компоненты. В задачах химической кинетики такая ситуация не редкость — она встречается при описании взрывных процессов [Полак и др., 1984, с. 132]. А для ПоБиК эта ситуация вообще совершенно обычна — достаточно вспомнить об экспоненциальном росте микробов.

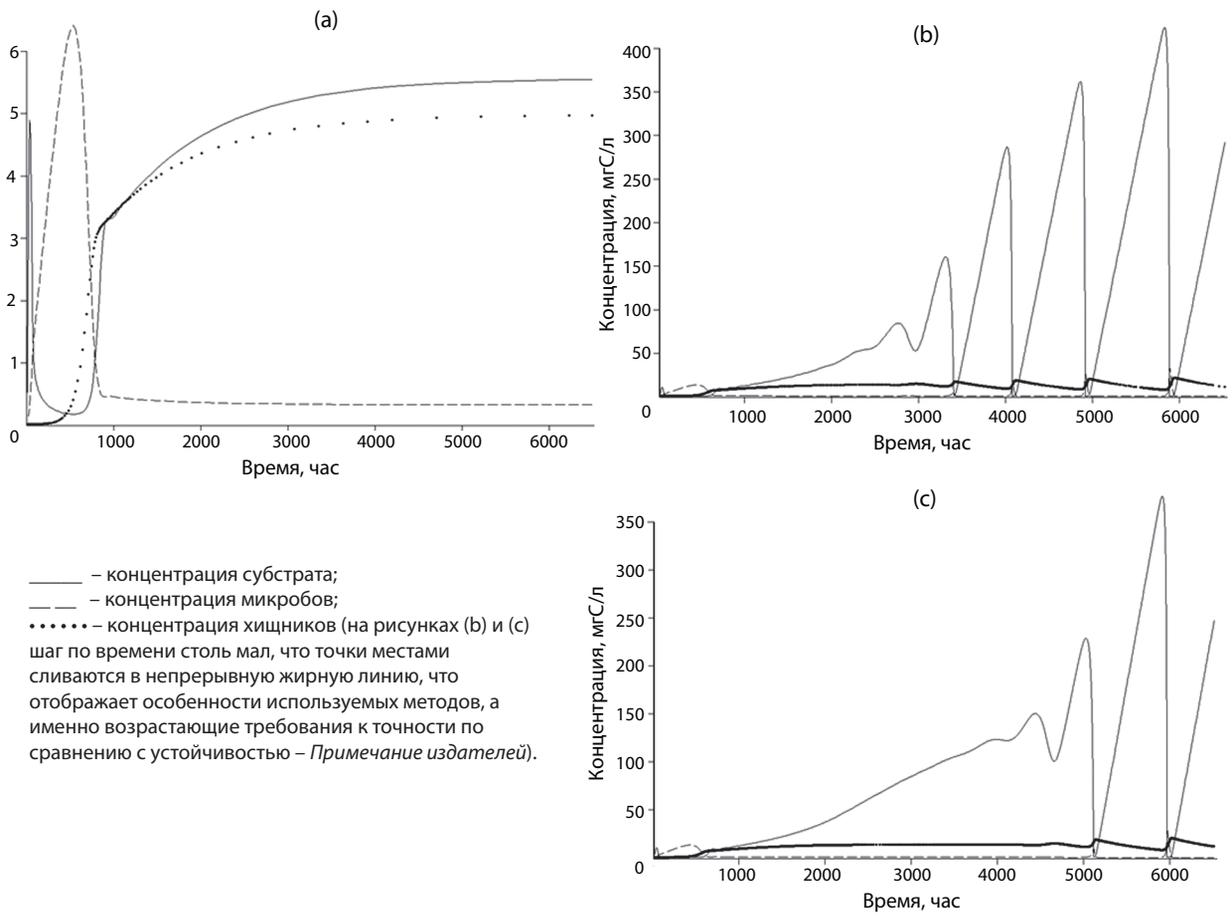


Рис. 2. Нестационарная однородная модель ризосферы: решение уравнений (1)–(3).
 (a) — $r_G = 0.2$ мгС/л/час; (b) — $r_G = 0.5$ мгС/л/час, интегрирование методом Гира;
 (c) — $r_G = 0.5$ мгС/л/час, интегрирование обратным методом Эйлера при тех же требованиях к точности, что в (b)

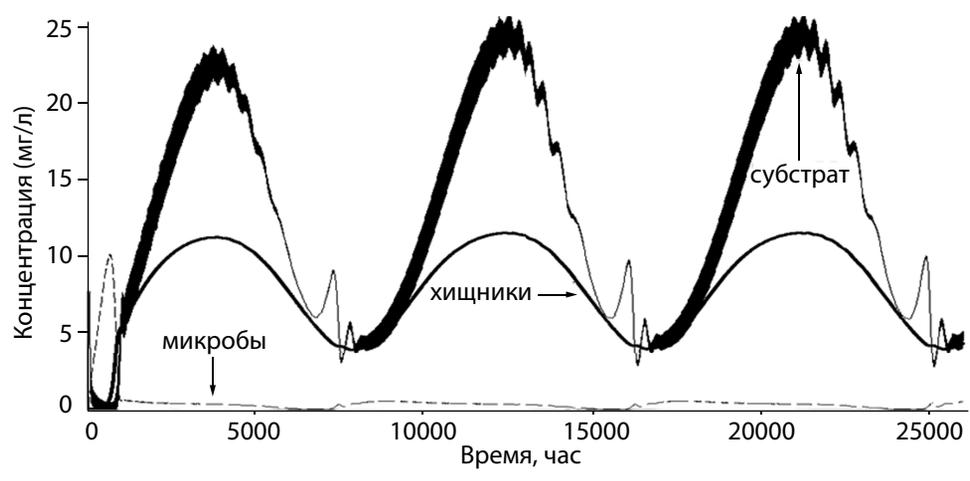


Рис. 3. Нестационарная однородная модель ризосферы при периодическом воздействии. В уравнениях (1)–(3) теперь принято: $r_G = 0.02 \cdot T \cdot [\sin(t \cdot 0.2618 - 2) + 1]$, $a = 0.0012 \cdot \text{fac}$, $E_m = 0.065 \cdot \text{fac}$, $m_m = 1.3 \cdot \text{fac}$, $\mu_m = 0.14 \cdot \text{fac}$, где температура $T = 10 \cdot [\sin(t \cdot 7.1726 \cdot 10^{-4} + 1)]$ и (согласно, [Вавилин и Васильев, 1979, с. 16]) $\text{fac} = 1.047^{T-20}$

В таких случаях сама задача Коши уже перестает быть устойчивой, поэтому нельзя требовать и устойчивости численного метода. Для преодоления этих трудностей Гир ввел требование жесткой устойчивости. Это дополнительное к абсолютной устойчивости требование обеспечивает точность аппроксимации растущего решения [Полак и др., 1984, с. 132]. Предложенный Гиrom алгоритм численного интегрирования жестких систем ДУ, получил широкое распространение. Этот алгоритм основан на использовании линейных многошаговых методов, удовлетворяющих требованиям жесткой устойчивости. При решении задачи Коши методом Гира в каждой точке выбирается оптимальный порядок метода, обеспечивающий наибольший возможный шаг интегрирования [Полак и др., 1984, с. 136]. На рис. 2 приведены результаты интегрирования методом Гира системы (1)–(3) в случае, когда $r_G = 0.2$ мгС/л/час (рис. 2, а) и $r_G = 0.5$ мгС/л/час (рис. 2b). В первом случае $r_G < 0.492$ мгС/л/час, следовательно, должно достигаться стационарное состояние и оно действительно достигается при тех значениях x , p и s , которые уже были определены выше (в разд. «Численно-аналитический...» и «Способ Ньютона-Рафсона...») из решения системы алгебраических и трансцендентных уравнений, соответствующей стационарному случаю. Для решения данной (не очень жесткой) задачи метод Гира затрачивает лишь на 27% меньше времени, чем метод Рунге-Кутты 4-го порядка. Однако это не значит, что метод Гира будет выигрывать всегда. На рис. 3 приведен результат интегрирования той же системы (1)–(3), но при более реалистичных условиях, приведенных в подписи к рис. Синусоида в T учитывает влияние сезонного изменения температуры на скорости процессов, а для r_G при помощи короткопериодичной синусоиды учитывается еще и влияние суточного цикла на поступление субстрата в ризосферу. Вследствие этого τ_{\min} определяется теперь уже не внутренними кинетическими параметрами системы, а внешним воздействием (с периодом в 1 сутки). Поскольку этим воздействием система все время выводится из стационарного состояния, то размер шага практически везде определяется точностью, а не устойчивостью, следовательно, явный метод получает преимущество над неявным. В результате, для расчета рис. 3 метод Гира требует в 8 раз больше времени, чем метод Рунге-Кутты 4-го порядка.

В заключение обратим внимание на результаты расчета при $r_G > 0.492$ мгС/л/час. Как видим (рис. 2, b), стационарное состояние не имеет места — система переходит в колебатель-

ный режим. То, что стационарного состояния при $r_G > 0.492$ мгС/л/час в данной системе нет, было понятно уже из анализа стационарной системы, так что полученный теперь результат не удивителен. Однако, интегрируя ту же самую задачу обратным методом Эйлера, мы получаем несколько иное решение (рис. 2с). Подобное расхождение в результатах, полученных разными методами, может свидетельствовать о серьезных вычислительных проблемах и всегда нуждается в тщательном анализе. К сожалению, в данном кратком докладе провести такой анализ не представляется возможным и, приводя рис. 2, с, я лишь хотел обратить внимание на то, что **численные методы не следует воспринимать как некое волшебное средство, автоматически решающее любые проблемы**. Нет! Тем кто хочет применять их в ПоБиК придется изрядно потрудиться, прежде чем они научатся сходу обходить все «подводные камни».

БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарность А. Строчкову, любезно разрешившему самостоятельно и практически неограниченно проводить расчеты на ЭВМ МИР-2¹ факультета почвоведения МГУ, и С.В. Мамихину, предоставившему возможность ограниченной работы на БЭСМ-6. Особая благодарность — выдающемуся советскому ученому Николаю Сергеевичу Паникову, подавшему саму идею написания данного доклада.

¹ У автора некоторые компьютерные программы были приведены в четырех версиях — на языках Аналитик (для ЭВМ МИР-2), ЯМК34, BASIC и FORTRAN. Из них первые два к настоящему времени практически совсем утратили какое-либо значение, а BASIC мало применяется в серьезных научных расчетах, поэтому мы оставили только FORTRAN-варианты программ (см. Приложение ниже). — *Примечание издателей.*

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица П1. Программа решения нелинейного уравнения, к которому сводится модель ризосферы

Основная программа и функция, задающая уравнение	Функция ZEROIN, решающая уравнение методом Брента
<pre> PROGRAM ZEROIN1 C СТАЦИОНАРНАЯ МОДЕЛЬ РИЗОСФЕРЫ C РЕШАЕТСЯ (ОТНОСИТЕЛЬНО P, S, X) СИСТЕМА C УРАВНЕНИЙ C C X*YRX*EM/(X+KX) - AL = 0 C RG-MUM*(1-EXP(-K*S))-MM*S*X/(S+KM) = 0 C MUM*(1-EXP(-K*S))-P*EM/(X+KX) = 0 C C МЕТОД РЕШЕНИЯ. C 1-ОЕ УРАВНЕНИЕ РЕШЕНО АНАЛИТИЧЕСКИ C ОТНОСИТЕЛЬНО X, C 2-ОЕ УРАВНЕНИЕ РЕШАЕТСЯ ЧИСЛЕННО C ОТНОСИТЕЛЬНО S (ПРИ X, НАЙДЕННОМ ИЗ 1-ГО C УРАВНЕНИЯ), C 3-Е УРАВНЕНИЕ РЕШЕНО АНАЛИТИЧЕСКИ C ОТНОСИТЕЛЬНО P (ПРИ X И S НАЙДЕННЫХ ИЗ 1-ГО C И 2-ГО УРАВНЕНИЙ). EXTERNAL F REAL A, B, Z, TOL, ZEROIN REAL AL,EM,K,MM,MUM,RG,X,Y REAL MUM,P,RG,X,Y,YRX COMMON /CONSTANTS/ K,MM,MUM,RG,X,Y C КИНЕТИЧЕСКИЕ КОНСТАНТЫ - ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ.. C C AL (1/ЧАС) - УДЕЛЬНАЯ СКОРОСТЬ C ОТМИРАНИЯ ХИЩНИКА C EM (1/ЧАС) - МАКСИМАЛЬНЫЙ МЕТАБОЛИ- C ЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ ХИЩНИКА C K (Л/МГ С) - ПАРАМЕТР ЗАВИСИМОСТИ C ТИСЬЕ M=MM*(1-EXP(-K*S)) C KM (МГ С/Л) - КОНСТАНТА МИХАЭЛИСА ДЛЯ C ПОДДЕРЖАНИЯ C KX (МГ С/Л) - КОНСТАНТА ПОЛУНАСЫЩЕНИЯ C ХИЩНИКА C MM (1/ЧАС) - МАКСИМАЛЬНАЯ УДЕЛЬНАЯ C СКОРОСТЬ ПОДДЕРЖАНИЯ C MUM (1/ЧАС) - МАКСИМАЛЬНАЯ УДЕЛЬНАЯ C СКОРОСТЬ РОСТА МИКРОВОБ C RG (МГ С/Л/ЧАС) - ИНТЕНСИВНОСТЬ ЭКЗООСМОСА C Y - ЭКОНОМИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ C РОСТА МИКРОВОБ C YRX - ЭКОНОМИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ C РОСТА ХИЩНИКА C C DATA AL,EM,K,MM/.0012,.065,.087,8.0/ C DATA KX,MM,MUM,RG/5.7,1.3,.14,.2/ C DATA Y,YRX,A/0.69,0.34,0.0/ C C X=AL*KX/(YRX*EM-AL) C B=RG*KM/(MM*X-RG) C TOL=1.0E-5 C Z=ZEROIN(A,B,F,TOL) C P=MUM*(1-EXP(-K*Z))*(X+KX)/EM C PRINT 2,RG,X C 2 FORMAT(4X,'RG=',E12.5,4X,'X=',E12.5) C PRINT 4,Z,P C 4 FORMAT(4X,'S=',E12.5,4X,'P=',E12.5) C STOP C END </pre>	<pre> REAL FUNCTION ZEROIN(AX,BX,F,TOL) REAL AX,BX,F,TOL C НУЛЬ ФУНКЦИИ F(X) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В ИНТЕРВАЛЕ AX, BX C ВХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.. C AX, BX - ЛЕВЫЙ И ПРАВЫЙ КОНЦЫ ИСХОДНОГО ИНТЕРВАЛА C F - ПОДПРОГРАММА-ФУНКЦИЯ, КОТОРАЯ ВЫЧИСЛЯЕТ F(X) C ДЛЯ ЛЮБОГО X В ИНТЕРВАЛЕ AX, BX C TOL - ЖЕЛАЕМАЯ ДЛИНА ИНТЕРВАЛА НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ C КОНЕЧНОГО РЕЗУЛЬТАТА C ВЫХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.. C ZEROIN - КОРЕНЬ ФУНКЦИИ F В ИНТЕРВАЛЕ AX, BX C БЕЗ ПРОВЕРКИ ПРЕДПОЛАГАЕТСЯ, ЧТО F(AX) И F(BX) ИМЕЮТ C ПРОТИВОПОЛОЖНЫЕ ЗНАКИ, ZEROIN ВЫЧИСЛЯЕТ НУЛЬ X В ЗАДАННОМ C ИТЕРВАЛЕ AX, BX В ПРЕДЕЛАХ ДОПУСКА НА ОШИБКУ C 4*EPS*ABS(X)+TOL, ГДЕ EPS - МАШИННАЯ ТОЧНОСТЬ. C ЭТА ПОДПРОГРАММА-ФУНКЦИЯ ПРИВЕДЕНА В КНИГЕ C ФОРСАЙТ И ДР., 1980, С. 180-183. REAL A,B,C,D,E,EP,FA,FB,FC,TOL1,XM,P,Q,R,S C ВЫЧИСЛИТЬ EPS - МАШИННУЮ ТОЧНОСТЬ EPS=1.0 EP=EPS/2.0 TOL1=1.0+EPS IF(TOL1.GT. 1.0) GO TO 10 ZEROIN=F(BX)*EP C ПРИСВОЕНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ A=AX B=BX FA=F(A) FB=F(B) C НАЧАТЬ ШАГ 20 C=A FC=FA D=B-A E=D 30 IF(ABS(FC) .GE. ABS(FB)) GO TO 40 A=B B=C C=A FA=FB FB=FC FC=FA C ПРОВЕРКА СХОДИМОСТИ 40 TOL1=2.0*EPS*ABS(B)+0.5*TOL XM=.5*(C-B) IF(ABS(XM) .LE. TOL1) GO TO 90 IF(FB .EQ. 0.0) GO TO 90 C НЕОБХОДИМА ЛИ БИСЕКЦИЯ IF(ABS(E) .LT. TOL1) GO TO 70 IF(ABS(FA) .LE. ABS(FB)) GO TO 70 C ВОЗМОЖНА ЛИ КВАДРАТИЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ IF(A .NE. C) GO TO 50 C ЛИНЕЙНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ S=FB/FA P=2.0*XM*S Q=1.0-S GO TO 60 C ОБРАТНАЯ КВАДРАТИЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ 50 Q=FA/FC R=FB/FC S=FB/FA P=S*(2.0*XM*Q*(Q-R)-(B-A)*(R-1.0)) Q=(Q-1.0)*(R-1.0)*(S-1.0) C ВЫБРАТЬ ЗНАКИ 60 IF(P .GT. 0.0) Q=-Q P=ABS(P) C ПРИЕМЛЕМА ЛИ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ IF((2.0*P) .GE. (3.0*XM*Q-ABS(TOL1*Q))) GO TO 70 IF(P .GE. ABS(0.5*E*Q)) GO TO 70 E=D D=P/Q GO TO 80 C БИСЕКЦИЯ 70 D=XM E=D C ЗАВЕРШИТЬ ШАГ 80 A=B FA=FB IF(ABS(D) .GT. TOL1) B=B+D IF(ABS(D) .LE. TOL1) B=B+SIGN(TOL1,XM) FB=F(B) IF((FB*(FC/ABS(FC)))) .GT. 0.0) GO TO 20 GO TO 30 C КОНЧЕНО 90 ZEROIN=B RETURN END </pre>
<pre> REAL FUNCTION F(S) REAL S REAL K,MM,MUM,RG,X,Y COMMON /CONSTANTS/ K,MM,MUM,RG,X,Y F=MUM*(1-EXP(-K*S))*X/Y+MM*S*X/(S+KM) F=RG-F RETURN END </pre>	

Таблица П2. Программа решения системы нелинейных уравнений стационарной модели ризосферы

Основная программа, вспомогательные подпрограммы и функция, задающая уравнения системы	Подпрограмма, решающая систему уравнений методом Ньютона-Рафсона
<pre> PROGRAM NERA EXTERNAL F REAL EPS1,X(10) INTEGER N,NDIM C ***** C СЛЕДУЮЩИЕ ДАННЫЕ ЗАДАЮТСЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ.. DATA EPS1,IFLP,N,NDIM/0.00001,1,3,10/ X(1)=0.0 X(2)=0.327 X(3)=0.0 C КОНЕЦ БЛОКА ДАННЫХ, ЗАДАВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ C ***** CALL NEWRAF(EPS1,F,IFLP,N,NDIM,X) PRINT 14, IFLP, X(1), X(2), X(3) 14 FORMAT(4X,I4,E12.5,1H,E12.5,1H,E12.5) END </pre>	<pre> SUBROUTINE NEWRAF(EPS1,F,IFLP,N,NDIM,X) C РЕШЕНИЕ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ C НЬЮТОНА-РАФСОНА C ВХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.. C EPS1 -ДОПУСТИМАЯ СУММА КВАДРАТОВ ПОГРЕШНОСТЕЙ C (НЕРАВЕНСТВА ПРАВЫХ ЧАСТЕЙ УРАВНЕНИЙ 0). C IFLP -ФЛАГ ВЫВОДА РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ C ИТЕРАЦИЙ НА ПЕЧАТЬ (ЕСЛИ IFLP=1). НА C ВЫХОДЕ ИЗ NEWRAF В IFLP ЗАПИСЫВАЕТСЯ C КОЛИЧЕСТВО ОСУЩЕСТВЛЕННЫХ ИТЕРАЦИЙ. C N - КОЛИЧЕСТВО УРАВНЕНИЙ В C СИСТЕМЕ (= КОЛИЧЕСТВУ НЕИЗВЕСТНЫХ). C NDIM -МАКСИМАЛЬНАЯ ДЛИНА ВЕКТОРА (НЕ МЕНЕЕ 2*N) C X - ВЕКТОР, В ПЕРВЫЕ N КОМПОНЕНТОВ КОТОРОГО C ЗАПИСЫВАЮТ НАЧАЛЬНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ К C СООТВЕТСТВУЮЩИМ НЕИЗВЕСТНЫМ. </pre>
<pre> REAL FUNCTION F(I,NDIM,X) C ПОДПРОГРАММА-ФУНКЦИЯ, В КОТОРОЙ ЗАДАНЫ C ЛЕВЫЕ ЧАСТИ УРАВНЕНИЙ СИСТЕМЫ DIMENSION X(NDIM) C ***** C СЛЕДУЮЩИЕ ДАННЫЕ ЗАДАЮТСЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ. REAL AL,EM,K,KM,KX,MM,MUM,RG,Y,YPX DATA AL, EM, K /.0012, .065, .087/ DATA KM, KX, MM /.8,5.7, 1.3/ DATA MUM,RG,Y,YPX/.14, .2,0.69,0.34/ GO TO (300, 310, 320) I 300 F=MUM*(1-EXP(-K*X(1)))*X(2)/Y F=RG-F-MM*X(1)*X(2)/(X(1)+KM) GO TO 330 310 F=MUM*(1-EXP(-K*X(1))) F=F-EM*X(3)/(X(2)+KX) GO TO 330 320 F=YPX*X(2)*EM/(X(2)+KX)-AL C КОНЕЦ БЛОКА ДАННЫХ, ЗАДАВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ C ***** 330 RETURN END </pre>	<pre> EXTERNAL F DIMENSION A(NDIM,NDIM),B(NDIM),FX(NDIM),H(NDIM) DIMENSION IPVT(NDIM),X(NDIM),X1(NDIM) REAL ABSSUM,FMH,FRH,HF INTEGER I,IFLAG,ITER,J,K IFLAG=1 K=20 ITER=0 16 IF(ITER.LT.K) GO TO 30 IF(IFLP.EQ.1) PRINT 20,K 20 FORMAT(3X,'MAX. ITERATIONS',I4,'ARE EXCEEDED') GOTO 250 30 ITER=ITER+1 ABSSUM=0.0 DO 50 I=1,N FX(I)=F(I,NDIM,X) ABSSUM=ABSSUM+FX(I)*FX(I) 50 CONTINUE IF(ABSSUM.GE.EPS1) GO TO 63 IFLAG=0 GO TO 94 63 DO 75 I=1,N CALL FD(I,NDIM,X,F,HF) X1(I)=X(I) 75 H(I)=HF C КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ ЯКОВИАН A(I,J)=DFI/DXJ DO 88 I=1,N DO 82 J=1,N X1(J)=X(J)+H(J) FRH=F(I,NDIM,X1) X1(J)=X(J)-H(J) FMH=F(I,NDIM,X1) A(I,J)=0.5*(FRH-FMH)/H(J) X1(J)=X(J) 82 CONTINUE C ФОРМИРУЕМ ВЕКТОР ПРАВЫХ ЧАСТЕЙ СЛАУ B(I)=-F(I,NDIM,X) 88 CONTINUE CALL MATDEC(N,NDIM,A,IPVT) CALL MATSOL(N,NDIM,A,IPVT,B,X) DO 91 I=1,N X(I)=X1(I)+X(I) 91 X(I)=X1(I)+X(I) 94 IF(IFLP.NE.1) GO TO 238 PRINT 97, ITER, ABSSUM 97 FORMAT(2X,'ITERATION =',I3, ' SSR =', E12.5) PRINT 98 98 FORMAT(6X,'ROOT LEFT SIDE OF EQUATION') DO 100 I=1,N PRINT 200, X(I), FX(I) 100 CONTINUE 200 FORMAT(4X, E12.5, 1H, E12.5) PRINT 225 225 FORMAT(2X, ' ') 238 IF(IFLAG.EQ.1) GO TO 16 250 IFLP=ITER RETURN END </pre>
<pre> SUBROUTINE MASHEP(EPS) C ВЫЧИСЛЕНИЕ МАШИННОЙ ТОЧНОСТИ (EPS) REAL EPS, TOL1 EPS=1.0 1000 EPS=EPS/2.0 TOL1=1.0+EPS IF(TOL1 .GT. 1.0) GO TO 1000 RETURN END </pre>	<pre> C ***** C СЛЕДУЮЩИЕ ДАННЫЕ ЗАДАЮТСЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ. DATA EPS1,IFLP,N,NDIM/0.00001,1,3,10/ X(1)=0.0 X(2)=0.327 X(3)=0.0 C КОНЕЦ БЛОКА ДАННЫХ, ЗАДАВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ C ***** CALL NEWRAF(EPS1,F,IFLP,N,NDIM,X) PRINT 14, IFLP, X(1), X(2), X(3) 14 FORMAT(4X,I4,E12.5,1H,E12.5,1H,E12.5) END </pre>
<pre> SUBROUTINE FD(I,NDIM,X,F,HF) C АВТОМАТИЧЕСКОЕ ОЦЕНИВАНИЕ КОНЕЧНО- C РАЗНОСТНОГО ИНТЕРВАЛА (HF) ДЛЯ C АППРОКСИМАЦИИ 1-ОЙ ПРОИЗВОДНОЙ C C ПОДПРОГРАММА РЕАЛИЗУЕТ ФОРМУЛУ (8.47) ИЗ C КНИГИ ГИЛЛ И ДР., 1985, С. 457 DIMENSION X(NDIM) REAL F,HF REAL EA,NU,W CALL MASHEP(EA) NU=1.0 W=1.0 HF=20*(NU+ABS(X(I))) HF=HF*SQRT(EA/(W+ABS(F(I,NDIM,X)))) RETURN END </pre>	<pre> C ***** C СЛЕДУЮЩИЕ ДАННЫЕ ЗАДАЮТСЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ. DATA EPS1,IFLP,N,NDIM/0.00001,1,3,10/ X(1)=0.0 X(2)=0.327 X(3)=0.0 C КОНЕЦ БЛОКА ДАННЫХ, ЗАДАВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ C ***** CALL NEWRAF(EPS1,F,IFLP,N,NDIM,X) PRINT 14, IFLP, X(1), X(2), X(3) 14 FORMAT(4X,I4,E12.5,1H,E12.5,1H,E12.5) END </pre>

Таблица ПЗ. Вспомогательные подпрограммы линейной алгебры

Подпрограмма, осуществляющая LU-разложение матрицы А	Подпрограмма, решающая систему линейных алгебраических уравнений с матрицей А, обработанной MATDEC
<pre> SUBROUTINE MATDEC(N,NDIM,A,IROW) C ЭТА ПОДПРОГРАММА-ФУНКЦИЯ ПРИВЕДЕНА В КНИГЕ С ПОЛАК И ДР., 1984, С. 251-252. INTEGER NDIM, N REAL A(NDIM,N),BIG,FACT,PIVOT,SIZE INTEGER I,I11,IPIV,IR,IROW(N) INTEGER J,JR,K,L,N11,NR IF(N.GT.1) GO TO 1 A(1,1)=1.0/A(1,1) IROW(1)=1 RETURN 1 DO 2 I=1,N 2 IROW(I)=I N11=N-1 DO 7 I=1,N11 BIG=0.0 DO 3 J=I,N JR=IROW(J) SIZE=ABS(A(JR,I)) IF(SIZE.LE.BIG) GO TO 3 BIG=SIZE IPIV=J CONTINUE IF(IPIV.EQ.I) GO TO 4 L=IROW(I) IROW(I)=IROW(IPIV) IROW(IPIV)=L 4 IR=IROW(I) PIVOT=1.0/A(IR,I) A(IR,I)=PIVOT I11=I+1 DO 6 J=I11,N JR=IROW(J) FACT=PIVOT*A(JR,I) A(JR,I)=FACT DO 5 K=I11,N 5 A(JR,K)=A(JR,K)-FACT*A(IR,K) 6 CONTINUE 7 CONTINUE NR=IROW(N) A(NR,N)=1.0/A(NR,N) RETURN END </pre>	<pre> SUBROUTINE MATSOL(N,NDIM,A,IROW,Y,X) C ВХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.. C N - КОЛИЧЕСТВО УРАВНЕНИЙ В СИСТЕМЕ C NDIM - МАКСИМАЛЬНАЯ ДЛИНА ВЕКТОРА (НЕ МЕНЕЕ 2*N) C A - МАТРИЦА СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ, ОБРАБОТАННАЯ C ПОДПРОГРАММОЙ MATDEC (Т.Е. НА ВХОД C MATSOL ПОДАЕТСЯ А В ТОМ ВИДЕ, В КОТОРОМ C ЕЕ ВЫДАЕТ MATSOL) C IROW - ВЕКТОР ПЕРЕСТАНОВОК, ВЫДАВАЕМЫЙ MATSOL C Y - ВЕКТОР ПРАВЫХ ЧАСТЕЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ C C ВЫХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.. C X - ВЕКТОР РЕШЕНИЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ C C ЭТА ПОДПРОГРАММА-ФУНКЦИЯ ПРИВЕДЕНА В КНИГЕ С ПОЛАК И ДР., 1984, С. 251-252. INTEGER N,NDIM INTEGER I,I10,IR,IROW(N),J,J11,JR,K REAL A(NDIM,N),S,X(N),Y(N) IF(N.GT.1) GO TO 8 X(1)=(1)*A(1,1) RETURN 8 IR=IROW(1) X(1)=Y(IR) DO 10 I=2,N IR=IROW(I) S=Y(IR) I10=I-1 DO 9 K=1,I10 9 S=S-A(IR,K)*X(K) 10 X(I)=S X(N)=X(N)*A(IR,N) DO 12 I=2,N J=N-I+1 JR=IROW(J) S=X(J) J11=J+1 DO 11 K=J11,N 11 S=S-A(JR,K)*X(K) 12 X(J)=S*A(JR,J) RETURN END </pre>

Примечание издателей: у автора в приведенном выше литстинге в строках комментариев русские слова были написаны английскими буквами; для удобства читателей мы дали комментарии по-русски.

ЛИТЕРАТУРА¹

- Агеев М.И., Алик В.П., Галис Р.М., Марков Ю.И. 1975. Библиотека алгоритмов 1б-50б. М.: Сов. радио. 176 с. [Ageev M.I., Alik V.P., Galis R.M., Markov Yu.I. 1975. Biblioteka algoritmov 1b-50b. M.: Sov. radio. P. 176 (In Russian)]
- Агеев М.И., Алик В.П., Марков Ю.И. 1981. Библиотека алгоритмов 151б-200б. М.: Радио и связь. 184 с. [Ageev M.I., Alik V.P., Markov Yu.I. 1981. Biblioteka algoritmov 151b-200b. M.: Radio i svyaz'. P. 184 (In Russian)]
- Белявский А.А., Гордин М.П., Лоскутов В.С. 1979. Подпрограммы для УВК М-4030 по реализации методов решения систем дифференциальных уравнений и управления печатью // Вопросы математического моделирования / Под ред. Крапивин В.Ф. М.: ИРЭ АН СССР. С. 369-380. [Belyavskii A.A., Gordin M.P., Loskutov V.S. 1979. Podprogrammy dlya UVK M-4030 po realizatsii metodov resheniya sistem differentsial'nykh uravnenii i upravleniya pechat'yu // Voprosy matematicheskogo modelirovaniya / Ed. Krapivin V.F. M.: IRE OF THE USSR Academy OF Sciences. P. 369-380. (In Russian)]
- Бененсон З.М., Елистратов М.Р., Ильин Л.К., Кравченко С.В., Сухов Д.М., Удлер М.А. 1981. Моделирование и оптимизация на ЭВМ радиоэлектронных устройств. М.: Радио и связь. 272 с. [Benenson Z.M., Elistratov M.R., Il'in L.K., Kravchenko S.V., Sukhov D.M., Udler M.A. 1981. Modelirovanie i optimizatsiya na EVM radioelektronnykh ustroystv. M.: Radio i svyaz'. P. 272 (In Russian)]
- Вавилин В.А., Васильев В.Б. 1979. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом. М.: Наука. 119 с. [Vavilin V.A., Vasil'ev V.B. 1979. Matematicheskoe modelirovanie protsessov biologicheskoi ochildki stochnykh vod aktivnym ilom. Moscow: Nauka. P. 119 (In Russian)]
- Годунов С.К. 1979. Уравнения математической физики. М.: Наука. 392 с. [Godunov S.K. 1979. Uravneniya matematicheskoi fiziki. Moscow: Nauka. P. 392 (In Russian)]
- Гутер Р.С., Резниковский П.Т. 1971. Программирование и вычислительная математика. М.: Наука. Вып. 2. Вычислительная математика. Программная реализация вычислительных методов. 264 с. [Guter R.S., Reznikovskii P.T. 1971. Programmirovaniye i vychislitel'naya matematika. Moscow: Nauka. Issue. 2. Vychislitel'naya matematika. Programmnaya realizatsiya vychislitel'nykh metodov. P. 264 (In Russian)]

¹ Мы дополнили авторский список литературы публикациями [Орлов и др., 1987; Шалашилин и Кузнецов, 1999; Glagolev, 2021]. — *Примечание издателей.*

8. Дрючина М.А. 1973. Основная программа № 0602: Метод Эйлера-Коши с итерациями для решения обыкновенного дифференциального уравнения // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 72-77. [Dryuchina M.A. 1973. Osnovnaya programma № 0602: Metod Eilera-Koshi s iteratsiyami dlya resheniya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 72-77. (In Russian)]
9. Дрючина М.А. 1973а. Основная программа № 0604: Метод Рунге-Кутты для решения обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 88-95. [Dryuchina M.A. 1973a. Osnovnaya programma № 0604: Metod Runge-Kutta dlya resheniya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya pervogo poryadka // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 88-95. (In Russian)]
10. Дрючина М.А. 1973b. Основная программа № 0605: Метод Рунге-Кутты для решения системы с автоматическим выбором шага // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 96-108. [Dryuchina M.A. 1973b. Osnovnaya programma № 0605: Metod Runge-Kutta dlya resheniya sistemy s avtomaticheskim vyborom shaga // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 96-108. (In Russian)]
11. Дрючина М.А. 1973с. Основная программа № 0606: Метод Кутты-Мерсона для решения обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 109-116. [Dryuchina M.A. 1973s. Osnovnaya programma № 0606: Metod Kutta-Mersona dlya resheniya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya pervogo poryadka // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 109-116. (In Russian)]
12. Дрючина М.А. 1973d. Основная программа № 0607: Метод Кутты-Мерсона для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 117-132. [Dryuchina M.A. 1973d. Osnovnaya programma № 0607: Metod Kutta-Mersona dlya resheniya sistemy obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 117-132 (In Russian)]
13. Дрючина М.А. 1973е. Основная программа № 0608: Метод Адамса для решения обыкновенного дифференциального уравнения // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 133-139. [Dryuchina M.A. 1973e. Osnovnaya programma № 0608: Metod Adamsa dlya resheniya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 133-139. (In Russian)]
14. Дрючина М.А. 1973f. Основная программа № 0609: Метод Адамса для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 140-152. [Dryuchina M.A. 1973f. Osnovnaya programma № 0609: Metod Adamsa dlya resheniya sistemy obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 140-152. (In Russian)]
15. Дрючина М.А. 1973g. Основная программа № 0610: Метод Милна для решения обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 153-160. [Dryuchina M.A. 1973g. Osnovnaya programma № 0610: Metod Milna dlya resheniya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya vtorogo poryadka // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 153-160. (In Russian)]
16. Дрючина М.А., Гец Е.Г. 1973. Основная программа № 0611: Метод Нумерова для дифференциального уравнения вида $y' = f(x)y$ // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 161-165. [Dryuchina M.A., Geets E.G. 1973. Osnovnaya programma № 0611: Metod Numerova dlya differentsial'nogo uravneniya vida $y' = f(x)y$ // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 161-165. (In Russian)]
17. Дрючина М.А., Левченко И.С. 1973. Основная программа № 0601: Метод Эйлера-Коши с итерациями для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 65-71. [Dryuchina M.A., Levchenko I.S. 1973. Osnovnaya programma № 0601: Metod Eilera-Koshi s iteratsiyami dlya obyknovennogo differentsial'nogo uravneniya pervogo poryadka // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 65-71. (In Russian)]
18. Емельянов Н.В. 1983. Методы составления алгоритмов и программ в задачах небесной механики. М.: Наука. 128 с. [Emel'yanov N.V. 1983. Metody sostavleniya algoritmov i programm v zadachakh nebesnoi mekhaniki. Moscow: Nauka. P. 128 (In Russian)]
19. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. 1972. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. М.: Наука. [Kafarov V.V., Vetokhin V.N., Boyarinov A.I. 1972. Programmirovanie i vychislitel'nye metody v khimii i khimicheskoi tekhnologii. Moscow: Nauka. (In Russian)]
20. Киперман С.Л. 1979. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. М.: Химия. 352 с. [Kiperman S.L. 1979. Osnovy khimicheskoi kinetiki v geterogennom katalize. Moscow: Khimiya. P. 352 (In Russian)]

21. Кокова В.Е., Лисовский Г.М. 1976. Непропорционально-проточная культура простейших. Новосибирск: Наука. [Kokova V.E., Lisovskii G.M. 1976. Neproportsional'no-protocchnaya kul'tura prosteishikh. Novosibirsk: Nauka. (In Russian)]
22. Кукебаев А.И. 1979. Стандартные программы решения систем нелинейных уравнений методом градиента // Вопросы математического моделирования / Под ред. Крапивин В.Ф. М.: ИРЭ АН СССР. С. 319-322. [Kukebaev A.I. 1979. Standartnye programmy resheniya sistem nelineinykh uravnenii metodom gradienta // Voprosy matematicheskogo modelirovaniya / Pod red. Krapivin V.F. M.: IRE OF THE USSR Academy OF Sciences. P. 319-322. (In Russian)]
23. Курский М.Д., Костерин С.А., Рыбальченко В.К. 1977. Биохимическая кинетика. Киев: Издат. объединение «Вища шк.». 264 с. [Kurskii M.D., Kosterin S.A., Rybal'chenko V.K. 1977. Biokhimicheskaya kinetika. Kiev: Izdat. ob»edinenie «Vishcha shk.». P. 264 (In Russian)]
24. Левченко И.С., Дрючина М.А. 1973. Основная программа № 0603: Метод Эйлера-Коши с итерациями для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Наукова думка. Т. 2. Кн. 3. С. 78-87. [Levchenko I.S., Dryuchina M.A. 1973. Osnovnaya programma № 0603: Metod Eilera-Koshi s iteratsiyami dlya resheniya sistemy obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: Naukova dumka. V. 2. N. 3. P. 78-87. (In Russian)]
25. Маергойз М.Д. 1973. Основная программа № 0312: Вычислительная схема решения систем нелинейных уравнений методом Монте-Карло // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 71-88. [Maergoiz M.D. 1973. Osnovnaya programma № 0312: Vychislitel'naya skhema resheniya sistem nelineinykh uravnenii metodom Monte-Karlo // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences OF THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 71-88. (In Russian)]
26. Маергойз М.Д., Реутова А.К. 1973. Основная программа № 0301: Метод половинного деления для вычисления изолированного корня уравнения $F(x)=0$ на отрезке $[A,B]$ // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 5-8. [Maergoiz M.D., Reutova A.K. 1973. Osnovnaya programma № 0301: Metod polovinnogo deleniya dlya vychisleniya izolirovannogo kornya uravneniya $F(x)=0$ na otrezke $[A,B]$ // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences of THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 5-8. (In Russian)]
27. Маергойз М.Д., Реутова А.К. 1973а. Основная программа № 0302: Метод пропорциональных частей для вычисления изолированного корня уравнения $F(x)=0$ на отрезке $[A,B]$ // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 9-12. [Maergoiz M.D., Reutova A.K. 1973a. Osnovnaya programma № 0302: Metod
- proportsional'nykh chastei dlya vychisleniya izolirovannogo kornya uravneniya $F(x)=0$ na otrezke $[A,B]$ // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences of THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 9-12. (In Russian)]
28. Маергойз М.Д., Реутова А.К. 1973б. Основная программа № 0303: Метод М.Л. Рыбакова для вычисления всех действительных корней уравнения $F(x)=0$ на отрезке $[A,B]$ // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 13-16. [Maergoiz M.D., Reutova A.K. 1973b. Osnovnaya programma № 0303: Metod M.L. Rybakova dlya vychisleniya vseh deistvitel'nykh kornei uravneniya $F(x)=0$ na otrezke $[A,B]$ // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences of THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 13-16. (In Russian)]
29. Маергойз М.Д., Реутова А.К. 1973с. Основная программа № 0304: Итерационный процесс Эйткина-Стеффенсена с ускоренной сходимостью для решения уравнения $F(x)=0$ // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 17-20. [Maergoiz M.D., Reutova A.K. 1973s. Osnovnaya programma № 0304: Iteratsionnyi protsess Eitkina-Steffensena s uskorennoy skhodimost'yu dlya resheniya uravneniya $F(x)=0$ // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences of THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 17-20. (In Russian)]
30. Маергойз М.Д., Реутова А.К. 1973д. Основная программа № 0311: Метод простой итерации для решения систем нелинейных алгебраических и трансцендентных уравнений // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. Т. 2. Кн. 2. С. 66-70. [Maergoiz M.D., Reutova A.K. 1973d. Osnovnaya programma № 0311: Metod prostoi iteratsii dlya resheniya sistem nelineinykh algebraicheskikh i transtsendentnykh uravnenii // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». Kiev: In-t kibernetiki Academy of Sciences of THE UKRAINIAN SSR. V. 2. N. 2. P. 66-70. (In Russian)]
31. Мешалкина Т.А. 1980. Методическое пособие по программированию на ЭВМ Мир-2. М.: Изд-во МГУ. [Meshalkina T.A. 1980. Metodicheskoe posobie po programirovaniyu na EVM Mir-2. M.: Publishing house MSU. (In Russian)]
32. Орлов Д.С., Минько О.И., Аммосова Я.М., Каспаров С.В., Глаголев М.В. 1987. Методы исследования газовой функции почвы // Современные физические и химические методы исследования почв. М.: Изд-во МГУ. С. 118-156. [Orlov D.S., Min'ko O.I., Ammosova Ya.M., Kasparov S.V., Glagolev M.V. 1987. Metody issledovaniya gazovoi funktsii pochvy // Sovremennye fizicheskie i khimicheskie metody issledovaniya pochv. Moscow: Publishing house MSU. P. 118-156. (In Russian)]
33. Орловский Н.В. 1980. Алексей Григорьевич Дояренко (1874-1958). М.: Наука. [Orlovskii N.V. 1980. Aleksei Grigor'evich Doyarenko (1874-1958). Moscow: Nauka. (In Russian)]

34. Паников Н.С. 1984. Использование кинетического подхода при изучении роста микроорганизмов в биогеоценозах // Микроорганизмы как компонент биогеоценоза / Под ред. акад. Е.Н. Мишустина. М.: Наука. С. 75-83. [Panikov N.S. 1984. Ispol'zovanie kineticheskogo podkhoda pri izuchenii rosta mikroorganizmov v biogeotsenozakh // Mikroorganizmy kak komponent biogeotsenoz / Ed. akad. E.N. Mishustina. Moscow: Nauka. P. 75-83. (In Russian)]
35. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. 1984. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука. 280 с. [Polak L.S., Gol'denberg M.Ya., Levitskii A.A. 1984. Vychislitel'nye metody v khimicheskoi kinetike. Moscow: Nauka. P. 280 (In Russian)]
36. Полуэктов Р.А., Пых Ю.А., Швытов И.А. 1980. Динамические модели экологических систем. Л.: Гидрометеоздат. [Poluektov R.A., Pyh Yu.A., Shvytov I.A. 1980. Dynamical Models of Ecological Systems. Leningrad: Gidrometeoizdat. (In Russian with English Abstract)]
37. Прохоров А.М. (ред.) 1983. Советский энциклопедический словарь. М.: Сов. энциклопедия. 1600 с. [Prokhorov A.M. (Ed.) 1983. Sovetskii entsiklopedicheskii slovar'. Moscow: Sov. entsiklopediya. P. 1600 (In Russian)]
38. Шалашилин В.И., Кузнецов Е.Б. 1999. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация (в прикладной математике и механике). М.: Эдиториал УРСС. 224 с. [Shalashilin V.I., Kuznetsov E.B. 1999. Metod prodolzheniya resheniya po parametru i nailuchshaya parametrizatsiya (v prikladnoi matematike i mekhanike). Moscow: Editorial URSS. 224 s. (In Russian)]
39. Эмануэль Н.М. 1979. О биологической кинетике // Методологические и теоретические проблемы биофизики / Под ред. Г.Р. Иваницкого. М.: Наука. С. 162-177. [Emanuel' N.M. 1979. O biologicheskoi kinetike // Metodologicheskie i teoreticheskie problemy biofiziki / Ed. G.R. Ivaniitskogo. Moscow: Nauka. P. 162-177. (In Russian)]
40. Эмануэль Н.М., Березин И.В., Варфоломеев С.Д. (ред.). 1983. Химическая и биологическая кинетика. М.: Изд-во МГУ. 296 с. [Emanuel' N.M., Berezin I.V., Varfolomeev S.D. (ed.). 1983. Khimicheskaya i biologicheskaya kinetika. M.: Publishing house MSU. P.296 (In Russian)]
41. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. 1984. Курс химической кинетики. М.: Высшая шк. 463 с. [Emanuel' N.M., Knorre D.G. 1984. Kurs khimicheskoi kinetiki. M.: Vysshaya shk. P. 463 (In Russian)]
42. Bray H.G., White K. 1957. Kinetics and Thermodynamics in Biochemistry. London: J. & A. Churchill Ltd.
43. Forsythe G.E., Malcolm M.A., Moler C.B. 1977. Computer Methods for Mathematical Computations. - Englewood Cliffs, N.J.: PRENTICE-HALL, Inc.
44. Garfinkel D. 1965. Theoretical and Mathematical Biology. Chapter 6 / Ed. by T.H. Waterman, H.J. Morowitz. New York etc.: BLAISDELL PUBLISHING Co.
45. Gill P.E., Murray W., Wright M.H. 1981. Practical Optimization. London etc.: Academic Press.
46. Glagolev M.V. 2021. Mathematical modeling of microorganism growth (analytical approach) // Environmental Dynamics and Global Climate Change. V. 12. No. 2. P. 107-122.
47. Johnson K.J. 1980. Numerical methods in chemistry. New York, Basel: Marcel Dekker, INC. 503 p.
48. Moshnyakova S.A., Karavaiko G.I. 1979. The effect of pH and temperature on the kinetics of Fe²⁺ oxidation by *Thiobacillus ferrooxidans* // Microbiology. V. XLVIII. No. 1. P. 49-52.
49. Panikov N.S., Afremova V.D., Aseyeva I.V. 1981. The growth kinetics of *Mucor plumbeus* and *Mortierella ramanniana* colonies on solid media containing glucose // Microbiology. V. 50. No. 1. P. 55-61.
50. Panikov N.S., Aseyeva I.V., Chistyakova I.K. 1980. Kinetics of continuous growth of the yeast *Debaryomyces formicarius* in chemostat and in continuous-flow columns with a solid phase // Microbiology. V. XLIX. No. 5. P. 794-803.
51. Pirt S.J. 1975. Principles of Microbe and Cell Cultivation. Oxford etc.: Blackwell Scientific Publications.
52. Shoup T.E. 1979. A Practical Guide to Computer Methods for Engineers. Englewood Cliffs, N.J.: PRENTICE-HALL, Inc.

Received: 15.09.2021

Revised: 25.11.2021

Accepted: 15.12.2021