

ЧАСТЬ 3. НЕКОТОРЫЕ МЕХАНИЗМЫ ХИМИЧЕСКОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДАМИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изложенные в предыдущей части работы методы молекулярного моделирования были использованы для прояснения деталей работы некоторых конкретных механизмов химической и биологической эволюции. Приведем здесь некоторые результаты, не вдаваясь в вычислительные подробности.

Распространение механического возмущения вдоль молекулярного пространства

Химия имеет дело с объектами, погруженными в плотную окружающую среду. При любой температуре $T > 0$ каждая молекула подвергается механическим ударам в результате теплового движения. Недавно появилась возможность детально проследить за судьбой такого отдельного механического возмущения либо серии последовательных возмущений в молекулярной модели практически неограниченной сложности. Проведен ряд компьютерных экспериментов с моделями различной структуры [6]. Для данной работы важны следующие результаты.

В анизотропных молекулярных пространствах локальное механическое возмущение распространяется по некоторым выделенным каналам в форме нерегулярных колебательных волн. Однако, эти волны не случайны. Их всегда можно представить суммой нормальных колебаний, присущих данной молекулярной среде. То есть внутренняя природа бегущих возмущений опять-таки определяется строго согласованными ядерными движениями. Как следствие этого, энергия возмущения не только рассеивается по всему молекулярному пространству, но иногда может концентрироваться в ограниченных областях. При подходящих структурных особенностях это может приводить к инициации локальных структурных превращений. Изучение таких превращений является предметом механохимии. Важно, что этот универсальный механизм объясняет такое распространенное явление, как самодеструкция длинных полимерных цепей. А это имеет прямое отношение к процессам в живом веществе и к механизмам эволюции. Тепловое разрушение структур биополимеров ведет, с одной стороны, к старению живого вещества, к порче хорошо настроенной химической машины живого организма. С другой стороны, это может приводить к мутациям.

Еще более важен результат, связанный с анализом роли слабых связей между элементами молекулярных структур в судьбе тепловых механических ударов. Выяснилось, что такие связи (водородные и ван дер Ваальсовы) практически не передают энергию механического удара в систему сильных химических связей. Отсюда выведены два следствия, касающихся эволюции добиологического и живого вещества.

Прочность супрамолекулярных структур.

Известна высокая устойчивость этих образований, поддерживающая их длительную эффективную функциональность. Устойчивость объясняется обнаруженной нами слабой проводимостью энергии тепловых ударов системой слабых связей, соединяющих разные части супрамолекулярной структуры. То есть участки пространства сильных связей, где и сосредоточена химическая функциональность, хорошо защищены от взаимного влияния тех тепловых возмущений, которым подвергаются эти участки независимо друг от друга. Удар же непосредственно по одной из систем сильных связей хорошо распространяется по этой системе, локализуется в ней, а поэтому может привести к ее повреждению не хуже, чем в обычной протяженной молекуле.

В ходе химической эволюции Природа изобрела супрамолекулы, обладающие высокой химической эффективностью и способностью к самосборке. Мы не проследили за историей такой эволюции, это отдельная сложная задача. Но методами молекулярного моделирования прояснили одну из причин высокой устойчивости этих химических систем, имеющих особую ценность для живого вещества и его эволюционной истории. Напомним, что ДНК является супрамолекулярной системой.

Компартментация как условие протекания ферментативной реакции.

Субстрат, попавший в полость активного центра фермента, образует с этой полостью супрамолекулярную систему. По данным биофизики, роль фермента на раннем этапе реакции состоит в распознавании специфического субстрата (избирательность) и в его однозначной ориентации относительно стенок полости (каталитическая функция). В большинстве ферментов эта полость довольно глубока. В ряде ферментов она находится в теле глобулы, под ее поверхностью, так что субстрат должен проникнуть в активный центр фермента с помощью конформационной подвижности поверхностных слоев третичной структуры белка. В полости субстрат взаимодействует со стенками, образуя временные слабые связи ради оптимальной ориентации молекул. Критерий оптимальности состоит в требовании минимального расстояния небольшого числа атомов

от их будущих новых потенциальных ям, в которых они должны будут закрепиться в результате катализируемой таким образом реакции.

Заметим, что здесь создаются условия протекания реакции в почти полной изоляции от окружающей среды, в которую погружен фермент. Эти условия были проанализированы в компьютерных экспериментах по распространению механических ударов в системе слабых связей. Как было сказано выше, слабые связи практически неспособны передавать энергию механических возмущений в систему химических связей молекул. Следовательно, ни субстрат, ни продукты ферментативной реакции в таких условиях не способны испытывать воздействия тепловых ударов со стороны окружения и массивного тела самого фермента. Отсюда следуют выводы, которые до сих пор в биофизике не были отмечены.

1. Ферментативная реакция проходит в строго стандартных условиях, близких к полной изоляции реагентов. Поэтому результаты реакции получаются стандартизованными. Теперь не может вызывать удивления тот факт, что при ферментативном синтезе крупных биологических молекул никогда не наблюдается ожидаемое разнообразие изомерных форм. Природа вообще экономна в демонстрации изомеров – требуются различные пути синтеза для получения различных изомеров сложного соединения. В ферментативных реакциях условия синтеза всегда строго одинаковы. Эти условия не могут быть нарушены вариациями интенсивности теплового движения в живом веществе.
2. Фермент проявляет новую, ранее неотмеченную функцию. Глубокая полость, где размещается активный центр, создает условия компартментации для субстрата и продукта. Таким образом, эволюция живого вещества привела к появлению компартментации практически на всех уровнях организации организма как химической машины. Все жизненно важные химические процессы в организме проходят в сравнительно строгих условиях изоляции друг от друга. Этому служат внешняя оболочка организма или клетки, мембраны клеточных органелл. А на молекулярном уровне это тело фермента, временно прячущее реагенты.
3. Для молекулярного моделирования важно, что при исследовании механизма конкретной ферментативной реакции можно строить более простую модель, чем при учете воздействия окружающей среды. Ферментативная реакция протекает в «вакууме». Следовательно, создаются условия для прямого прогнозирования вероятности протекания реакции методами последовательной квантовой теории [9]

без опасений, что учет окружающей среды серьезно повлияет на прогноз. Можно считать, что здесь физической теории химических процессов крупно повезло.

Последнее обстоятельство позволяет дать ясную интерпретацию результатам работ Галимова по изучению изотопного фракционирования в продуктах биологического происхождения. В этих работах обнаружены и обсуждаются такие особенности изотопного фракционирования в продуктах ферментативных реакций, которые нашли свое объяснение лишь с помощью предположения, что в процессе такой реакции вещество многократно переходит из начальной формы в конечную, и назад. Это явление было названо микрообратимостью и противопоставлено известной необратимости биосинтеза в целом. Но ведь это предположение буквально совпадает с недавно выявленным в теории [9] механизмом элементарного акта любого химического превращения. Механизм этот состоит в квантовых биениях молекулярной системы между стационарными состояниями «до реакции» и «после реакции». Следовательно, теперь можно считать, что особенности изотопного фракционирования прямо отражают физику химического превращения. Современная квантовая теория акта химического превращения, примененная к проблеме механизма ферментативной реакции, подтверждает справедливость предположения о микрообратимости этого процесса.

Заметим также, что субстрат до попадания в полость фермента находится в тепловом равновесии с окружающей средой организма. В полости реагенты оказываются в условиях изоляции. Они не могут потерять свою полную энергию, пока не произойдет излучения кванта энергии при закреплении состояния «после реакции». В процессе квантовых биений молекулярная система продолжает находиться в температурном равновесии с окружением. Поэтому можно сказать, что оправдано утверждение Галимова, что условия ферментативной реакции близки к условиям термодинамического равновесия.

В неферментативных реакциях химическое превращение происходит в условиях воздействия окружающей среды. Конечно, и там происходят квантовые биения. Однако тепловое движение сбивает ход биений механическими ударами, заставляя систему совершить вынужденный переход в новое состояние, когда переход реализуется (или в прежнее состояние, когда реакция не состоялась). Под воздействием окружения время существования молекулярной системы в состоянии квантовых биений существенно сокращается, тем самым реализуются совершенно иные условия изотопного фракционирования.

В работах по изучению изотопного фракционирования в продуктах ферментативных реакций не всегда наблюдаются данные, говорящие о протекании реакции в условиях полной термодинамической изоляции. Этот факт становится понятным, если учесть, что некоторые ферментативные реакции проходят с участием кофакторов. Если кофактор является частью тела фермента, то он тем самым связывает реагирующую систему и с телом белка, и с окружением белка. И там, и там происходит тепловое движение, которое сбивает в какой-то мере квантовые биения в системе и уменьшает время этих биений. Реакция в такой системе протекает в условиях меньшей изоляции, что сказывается на результатах изотопного фракционирования.

Эффекты одновременного возбуждения многих нормальных колебаний в крупной органической молекуле

Известно, что в молекуле реализуются одновременно все нормальные колебания. Даже при $T = 0$ возбуждены все нормальные колебания при значениях всех квантовых чисел $\nu = 0$. Этому соответствует значительная колебательная энергия крупной органической молекулы. В веществе в условиях термодинамического равновесия при $T > 0$ колебательные уровни энергии ансамбля молекул заселены в соответствии с распределением Больцмана. Однако, молекулярная физика до сих пор не интересовалась конкретной картиной внутримолекулярных движений в молекуле, где различные нормальные колебания возбуждены до различных значений колебательных квантовых чисел $\nu > 0$.

С помощью специально разработанных компьютерных программ мы провели ряд экспериментов, показавших, что происходит в молекуле при сложении нескольких нормальных колебаний с высокими значениями ν . Оказалось, что результаты наблюдений позволяют количественно объяснить ряд биофизических явлений и предположить важность этих явлений в эволюционной истории живого вещества.

Механика суммарных колебаний в молекулярной среде.

Результат сложения нормальных колебаний в молекулярном объекте существенно зависит от симметрии объекта. Вся физика твердого тела базируется на факте наличия трансляционной симметрии в кристаллах. Там нормальные колебания среды организуются в форме стоячих волн. Получаются движения, периодические во времени и в пространстве. Это явление сравнительно легко поддается анализу и позволяет прогнозировать такие физические проявления вещества, как теплоемкость. В биополимерах симметрия отсутствует. Поэтому никакие стоячие волны в живом веществе

наблюдаться не могут, а результат суммирования многих нормальных колебаний в сложной органической молекуле можно проанализировать лишь численными методами. Предсказать физические и химические следствия одновременного возбуждения нескольких колебаний до высоких значений квантовых чисел ν также можно только средствами молекулярного моделирования. Наш опыт показывает, что это дает интересные результаты, ведущие к важным для биофизики заключениям.

Известно, что при сложении колебаний с произвольным соотношением частот получается результирующее непериодическое колебание. В сложной органической молекуле складываются многочисленные нормальные колебания, частоты которых лежат в очень широком диапазоне, причем отношения частот бывают совершенно произвольными. В результате, получаются движения, непериодические во времени и в пространстве. Для нас важно, что амплитуды этих движений очень прихотливо зависят от времени. В естественных колебательных координатах можно наблюдать такие моменты, когда даже при сравнительно низких возбуждениях отдельных нормальных колебаний определенные колебательные координаты вдруг приобретают большие энергии. В декартовых координатах тогда наблюдаются резкие сближения некоторых атомов в молекуле. Это дает возможность понять, диагностировать и прогнозировать явления, связанные с химическими превращениями в крупных органических молекулах.

Построена и эксплуатируется сервисная программа, позволяющая выбрать из списка всех нормальных колебаний некоторые колебания, задать значения их колебательных квантовых чисел $\nu > 0$ и наблюдать результирующие колебания. Этот инструмент удобен для упрощенной диагностики реакций. Имеется возможность непосредственно наблюдать, насколько близко участвующие в реакции атомы подходят к их новым положениям и насколько часто это случается. В фотохимической реакции можно выяснить, какие именно колебания в молекуле и насколько должны быть возбуждены излучением, чтобы реакция прошла с заметным квантовым выходом.

Для биофизики, в частности, для физики ферментативных реакций можно сделать такой вывод. Субстрат перед попаданием в полость фермента находится в тепловом равновесии со средой. Значит, в молекуле возбуждены какие-то нормальные колебания с $\nu > 0$. Вероятности этих возбуждений следуют распределению Больцмана при данной температуре. Это обеспечивает молекуле заметный запас полной колебательной энергии, поскольку молекула располагает множеством нулевых вкладов в энергию ($E_0 = 1/2\nu \text{ см}^{-1}$ для одного нулевого колебания) и несколькими вкладами повышенной энергии ($E_\nu = \nu(\nu + 1/2) \text{ см}^{-1}$ для каждого возбужденного колебания). Попадая в полость фермента, молекула

не может потерять эту энергию, но не может и приобрести добавочную механическую энергию теплового движения из-за слабых связей с телом фермента. Следовательно, этот первоначальный запас колебательной энергии молекулы и есть та энергия, которая может частично потратиться на активацию реакции. И чем крупнее молекула субстрата, тем больше этот запас энергии. Этим и объясняется частично тот факт, что биохимические реакции протекают при очень низких температурах. Полное объяснение этого факта включает еще представление о туннельном механизме реакций и о роли снижения резонансных уровней ангармоническим характером колебаний молекул.

Теперь становится ясно, почему эволюция живого вещества на самой ранней стадии пошла в сторону отбора крупных жизненно важных молекул. Такие молекулы имеют многочисленные уровни колебательной энергии, что облегчает возникновение квантовых биений между различными формами реагирующей молекулярной системы. Такие молекулы могут легко запасать тепловую энергию в термодинамическом равновесии с окружением и затем тратить часть этой энергии на активацию химического превращения. Кроме того, такие молекулы конформационно чрезвычайно подвижны, что облегчает их адаптацию к условиям протекания реакций. В частности, в сложном акте ферментативной реакции молекулярная система должна проникнуть в полость фермента, там пространственно сориентироваться, а после реакции продукт и фермент должны понять, что они теперь чужие. Без конформационной подвижности, без электрон-конформационного взаимодействия по Волькенштейну такая приспособляемость была бы совершенно неосуществима.

Динамическая устойчивость сложных биохимических систем от живого организма и экосистем до биосферы

Мы провели ряд компьютерных экспериментов с целью выяснения условий устойчивости экосистем. Эксперименты основаны на последовательном усложнении модели системы и соответствующей системы дифференциальных уравнений типа Лотки-Вольтерра. Проверка полученных результатов выполнена путем их сравнения со статистическими данными о столетней динамике в охотничьем хозяйстве Канады. Там были зарегистрированы данные о поведении очень малой подсистемы, состоящей только из популяций одного вида хищников и одного вида жертв. Деятельность охотников в эту статистику не попала.

Охотничье хозяйство, своеобразная экосистема, представляет собой обширный лес с полянами, где растет трава, где ею питаются кролики. Будем называть их Rabbits (по-

русски это зайцы, но пример привязан к канадским данным), а их популяцию в тысячах обозначать переменной R . Площадь, занятую травой, будем измерять в процентах от общей площади леса, и обозначать переменной G (Grass). Учтем, что кроликам не дают умереть от старости Лисы, популяцию которых в тысячах будем обозначать переменной F (Foxes). Лисам тоже не грозит умирать от старости. В этих угодьях планомерно работают охотники, добывающие на продажу лисьи шкуры. Численность охотников мы не будем учитывать явно, а сведем их деятельность к высокой вероятности смерти лисицы в результате случайной-плановой встречи с охотником.

Мы хотим промоделировать поведение этой экосистемы и прогнозировать динамику популяций действующих лиц R и F .

Но для начала познакомимся с реальной действительностью на примере данных меховой компании из Канады [19], воспроизведенной на рисунке 18.

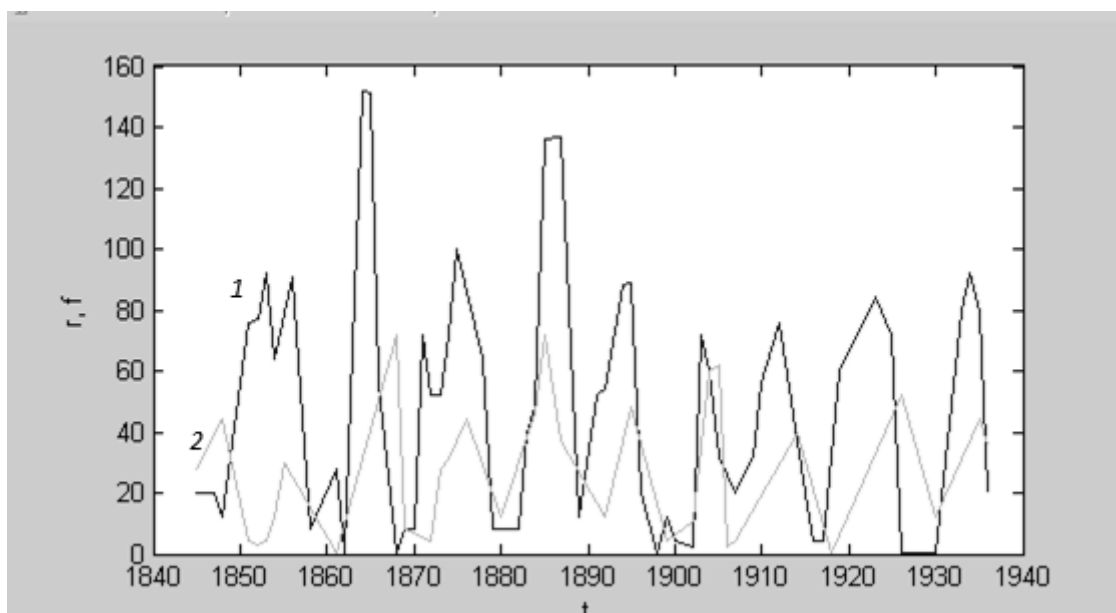


Рис. 18. Динамика жертв 1 и хищников 2 в Канаде.

Попробуем что-то понять в этой картине с помощью простых рассуждений. Обсудим только главные характерные черты картины – колебания обеих популяций и отставание популяции хищников по фазе. Это отставание бывает большим или меньшим, но всегда популяция хищников растет после роста популяции жертв. Исключение наблюдается только вблизи 1885 года.

Рассуждаем. Крупному хищнику нужно достичь брачного возраста, накопить много энергии, только тогда он начнет интенсивно размножаться. Такие условия хищнику предоставляет большая популяция жертв. Увеличение популяции хищников приводит к

интенсивному истреблению жертв. Но тогда наступает ухудшение условий питания хищников и замедление их размножения. Вспомним, что дело происходит в охотничьих угодьях. У каждого хищника есть заметная вероятность превратиться в меховой товар. В результате популяция хищников уменьшается. Но тогда наступает более благополучная жизнь у жертв. Они могут более интенсивно питаться и размножаться.

Таким образом, мы поняли, почему происходят колебания двух популяций, поняли, почему хищники отстают по фазе в развитии своей популяции. Можно также понять, почему популяция хищников в пиках всегда меньше пиковой популяции жертв.

Теперь подумаем об источнике пищи для жертв. Они питаются растительной пищей, которой должно быть довольно много, ибо эта пища некалорийна. Если почему-то этот источник питания исчезнет, произойдет экологическая катастрофа. Жертвы перестанут размножаться, но тогда и хищники погибнут от голода.

Упростим себе задачу, и будем считать, что трава представляет собой возобновляемый ресурс. Пусть сегодня кролики съели всю траву на полянах, но Природа милостива. Идут дожди, светит Солнце, корни травы не повреждены. Завтра трава вырастет снова. Но ясно, что чем больше площадь полян, тем вольготней питаются и размножаются кролики.

А вот теперь попробуем путем одних рассуждений предсказать, кому станет лучше, кроликам или хищникам, если хозяева этих угодий расчистят дополнительные площади для полян с травой. На этот и подобные вопросы легче отвечать, формализовав наши представления. Составим систему дифференциальных уравнений, называемую моделью Вольтерра. Этот ученый впервые таким образом проанализировал события в системе Хищники-Жертвы. Ранее Лоттка пришел к такой же системе дифференциальных уравнений, изучая события в ходе автокаталитических химических реакций. Поэтому в литературе за такой моделью утвердилось название модели Лоттки-Вольтерра.

$$dR/dt = k_{rb}GR - k_{rd}RF, \quad (1)$$

$$dF/dt = k_{fb}RF - k_{fd}F, \quad (2)$$

где k_{rb} - коэффициент рождаемости кроликов (rabbits birth), k_{rd} - коэффициент смертности кроликов (rabbits death), k_{fb} - коэффициент рождаемости лис (foxes birth), k_{fd} - коэффициент смертности лис (foxes death) в результате деятельности охотников. Остальные обозначения были приведены выше.

Проанализируем систему уравнений (1-2). Сразу видно, что система допускает стационарное решение, то есть при заданных материальных параметрах системы полностью определяются не меняющиеся со временем популяции R_0 и F_0 . Приравниваем нулю производные в (1-2) и видим, что в стационарном случае система уравнений распадается на два независимых уравнения, из которых находим

$$F_0 = k_{fb}G/k_{fd}, \quad (3)$$

$$R_0 = k_{fd}/k_{fb}. \quad (4)$$

Может вызвать некоторое удивление, что лисья стационарная популяция определяется исключительно кроличьими параметрами, а кроличья – лисьими, куда неявно включена деятельность охотников. Из (3) видно, что увеличение площади полей с травой приведет к увеличению стационарной популяции лис, а не популяции кроликов, как может ожидать неподготовленный человек. На стационарной же популяции кроликов увеличение их пищевого ресурса никак не скажется.

Составим программу численного решения системы дифференциальных уравнений (1-2), снабдив ее материальными коэффициентами, начальными условиями и задав подходящий интервал времени интегрирования. Например, при $G = 1.2$ процента площади угодьев под травой и при $k_{fb} = 0.2$ за единицу времени и на одну тысячу кроликов их будет рождаться 240. Мы пока введем некую условную единицу времени. При $k_{fb} = 0.07$ на тысячу лис при их обеспеченности одной тысячей кроликов за ту же единицу времени будет появляться 70 лисят. За ту же единицу времени из тысячи лис охотники добудут 200 шкур. При выбранных значениях параметров получим и введем в программу в качестве начальных условий $R_0 = 2.857$, $F_0 = 1.2$.

Мы увидим, что численное интегрирование вполне подтвердило наш прогноз. Ни одна из популяций не меняется. Это динамическое равновесие и стационарное состояние открытой неравновесной системы. Лисы поедают кроликов и превращаются в ценные шкурки меха. На то она и экономика, чтобы кто-то кого-то съедал. Зато экономика в этом частном случае прекрасно налажена. Конвейер, да и только. Никаких сбоев.

Выведем систему из стационарного состояния, немного изменив начальные значения популяций. Положим теперь $R_0 = 2.857$, $F_0 = 1.2$. Получим такой ожидаемый результат, где наблюдаются небольшие колебания вокруг стационарных значений популяций.

Анализ (1 и 2) показывает, что при малых отклонений от стационарного состояния модель является линейной. В ней возникают гармонические колебания популяций с уже понятным нам сдвигом фаз. Вот эти следствия из линейности модели.

Модель предсказывает нам, что период малых колебаний

$$T = 2\pi (k_{fb}G k_{fd})^{-1/2}.$$

При наших значениях параметров модель нам дает теоретическое значение $T_T = 28.68$ принятых в модели единиц времени. В расчете мы находим $T_p = 28.2$.

Для отношения амплитуд малых колебаний популяций кроликов и лис модель предсказывает выражение и значение $(k_{fd}/k_{fb})(k_{fb}G/k_{fd})^{1/2} = 3.13$. В расчете мы получили 2.66. Некоторое расхождение в периоде и в отношении амплитуд можно списать на некоторое отклонение от линейности при наших начальных условиях.

Сравнение таких результатов с рисунком 18 убеждает нас, что реальная экологическая система очень далека от стационарного состояния, а следовательно, заметно нелинейна. Выясним, каковы причины этой нелинейности.

Зададимся начальными популяциями $R_0 = 1.0$, $F_0 = 1.0$ и посмотрим, какой прогноз поведения системы выдаст наша программа. Результаты показаны на рисунке 19.

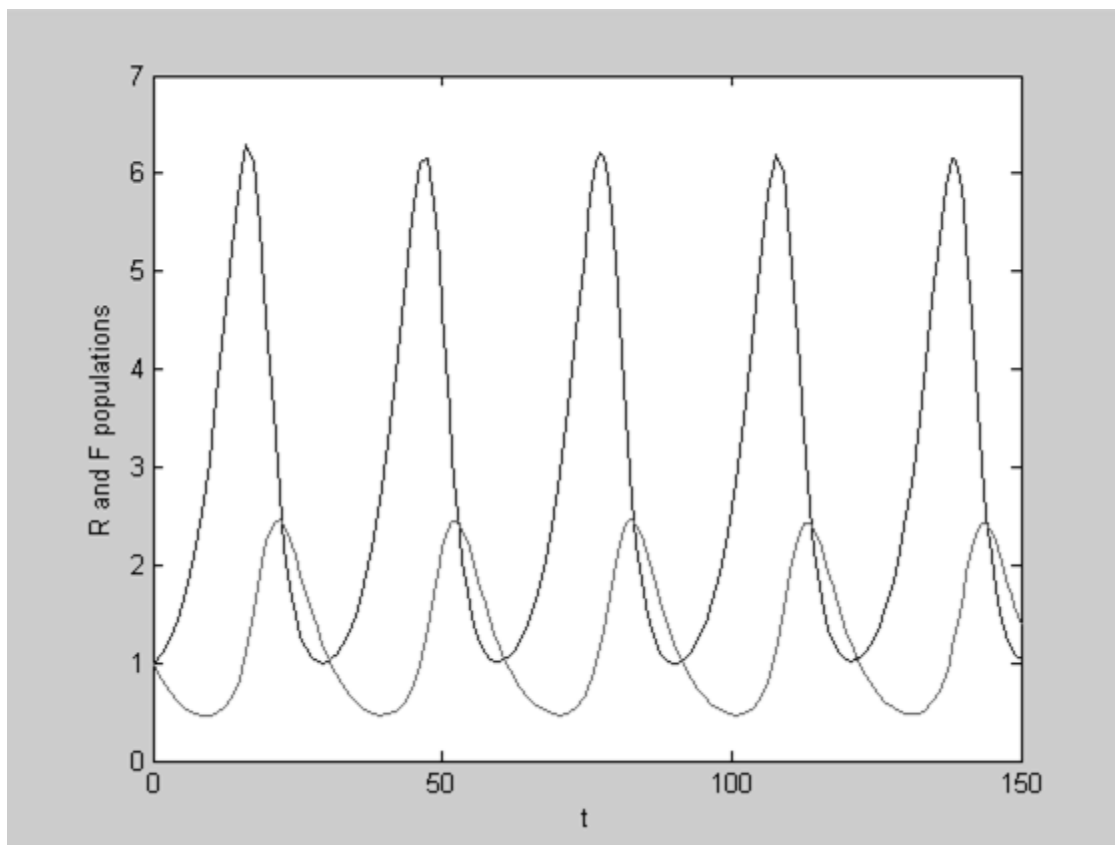


Рис. 19. Ангармонические колебания при большом удалении модели Хищники-Жертвы от равновесного состояния.

Модель не стала сложнее. Изменился только характер колебаний. Однако при других параметрах системы в ней могут возникнуть опасные с экологической точки зрения состояния. В частности, при увеличении G популяция кроликов начинает колебаться опасным для нее образом. В минимумах она становится очень низкой, а время существования популяции на низком уровне сильно затягивается. Тогда любая случайность в эту часть периода колебаний может погубить малую популяцию. Например, эпизоотия.

Теперь поведение модели вчерне напоминает то, что изображено на рисунке 18. Но только вчерне. В модель совершенно не заложены случайные события, а в реальной действительности они происходят одно за другим. Засуха, эпизоотии и многое другое. Кроме того, у нас в модели очень мало действующих лиц. Настолько мало, что модель очень слабо напоминает реальную действительность.

Попробуем так усовершенствовать модель, чтобы она стала более прогностичной. Мы уже наметили два пути совершенствования модели. Сначала попытаемся промоделировать случайности и посмотрим, приблизится ли динамика модели к реалистической динамике рассматриваемых популяций. Затем попробуем расширить список действующих лиц.

Введем небольшие колебания в значения параметра G . Это промоделирует чередование засушливых и дождливых сезонов. Введем амплитуду и частоту колебаний площади, занятой травой.

Теперь рост и падение популяции кроликов уже не происходит по гладким экспонентам. Но нет главного. Мы не получили случайного сдвига фаз, который наблюдается на рисунке 18, а также заметного изменения со временем амплитуд колебаний.

Придется вводить новых действующих лиц. Учтем, что лисы едят мышей (M), популяция которых M в лесу обычно очень велика. Усложним систему уравнений. В ней появится новое уравнение

$$dM/dt = k_{mb}GM - k_{md}FM.$$

Здесь учтено, что мыши питаются семенами трав, а потому скорость прироста их популяции зависит от параметра G . Далее, в уравнении для популяции лис введем сумму $R + M$ как лисий пищевой ресурс. Получится такое уравнение

$$dF/dt = k_{fb}(R + M)F - k_{fd}F.$$

Мы не стали здесь учитывать колебания параметра G , чтобы почувствовать влияние только одного нового фактора. Вот какой прогноз, приведенный на рисунке 20, дает измененная модель.

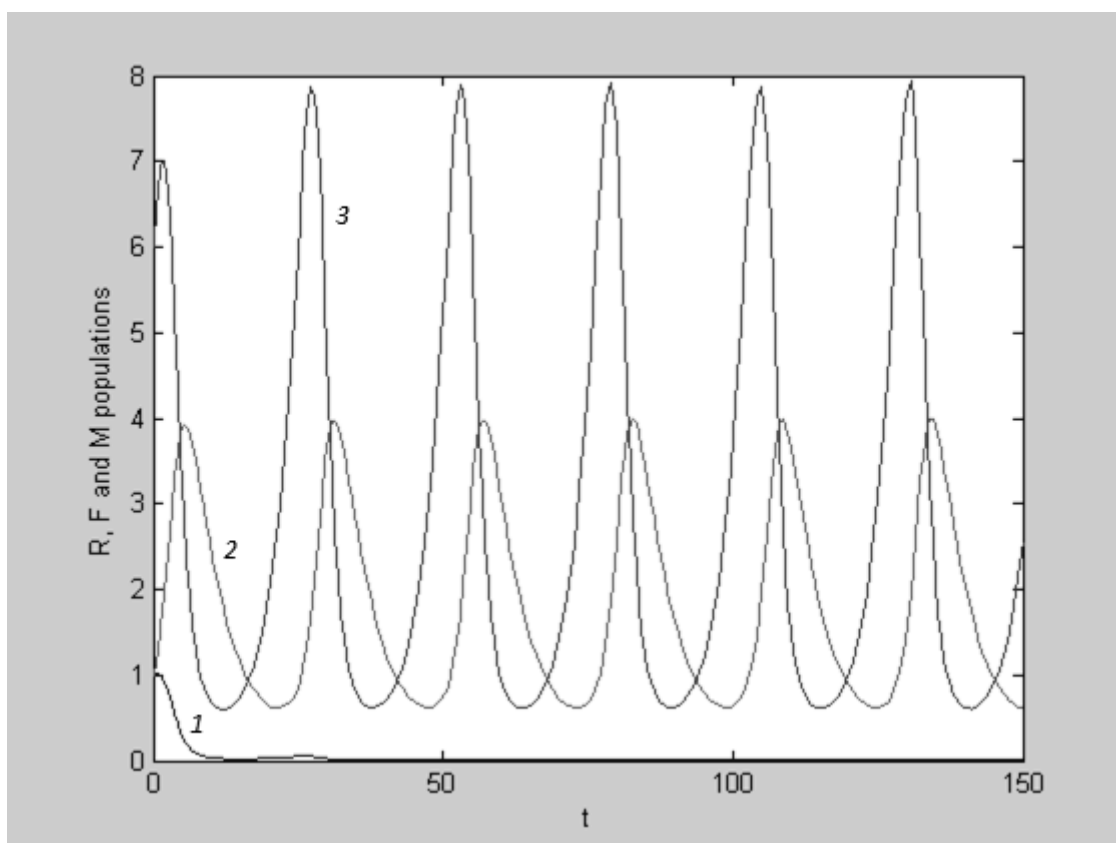


Рис. 20. Динамика системы популяций Кроликов 1, Лис 2 и Мышей 3.

Мы видим, что предсказательная мощь модели заметно увеличилась. Мы в расчете получили следствие, до которого вряд ли кто-то, не будучи специалистом, мог бы додуматься без обращения к расчету. Появление в лесу полчищ мышей подкрепило популяцию лис, и те съели начисто всех кроликов.

Попытаемся спасти популяцию кроликов. Для этого надо ввести еще одно действующее лицо. Это сова (Owl), которая способна за ночь съесть несколько мышей.

Динамику популяции сов O опишем уравнением

$$dO/dt = k_{ob}MO - k_{od}FO.$$

Здесь учтено, что кто-то уничтожает и сов (ястебы?).

Уравнение для популяции мышей приобретет такой вид

$$dM/dt = k_{mb}GM - kmd(F + O)M.$$

Теперь мы учли все доступные нам факторы, включая случайные. Получаем прогноз поведения системы, показанный на рисунке 21.

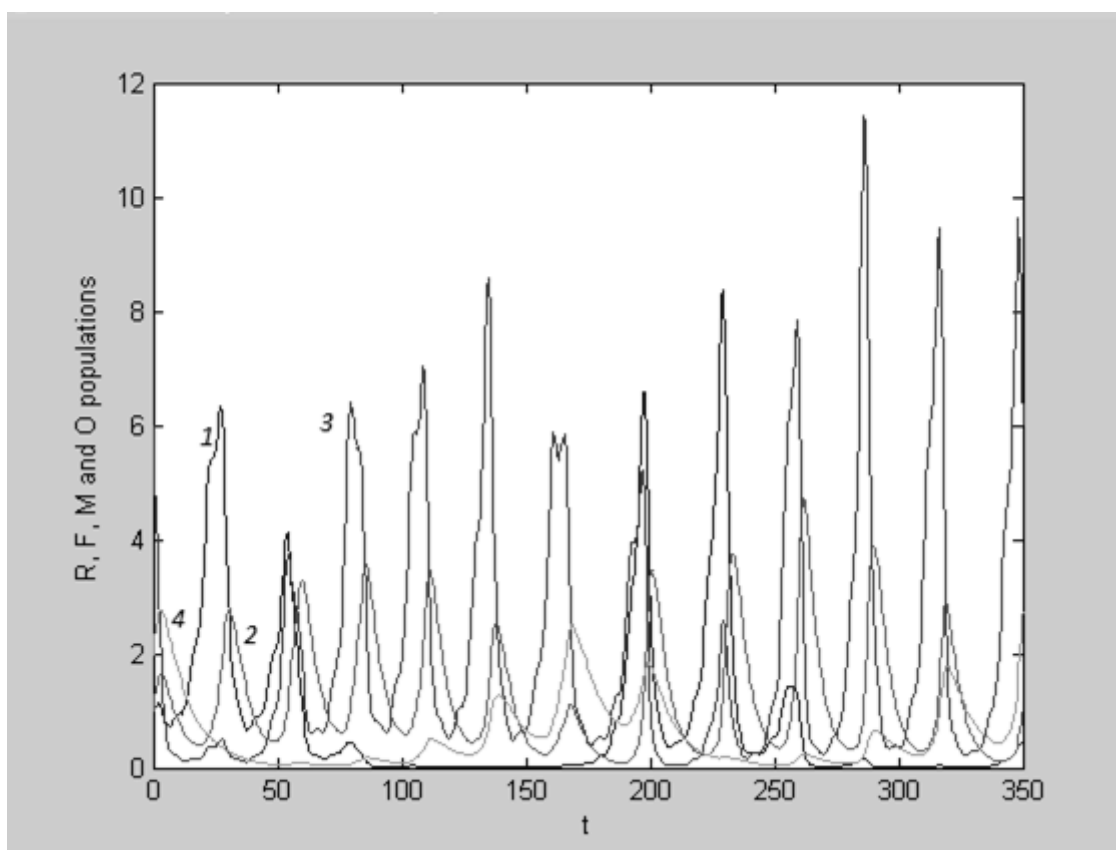


Рис. 21. Динамика системы популяций Кроликов 1, Лис 2, Мышей 3 и Сов 4.

Урожайность травы в лесу подвержена колебаниям.

Прогнозируема картина поведения экологической системы теперь весьма сложна. Поэтому выделим из нее графики популяций лис и кроликов. Получим более прозрачную картину, показанную на рисунке 22.

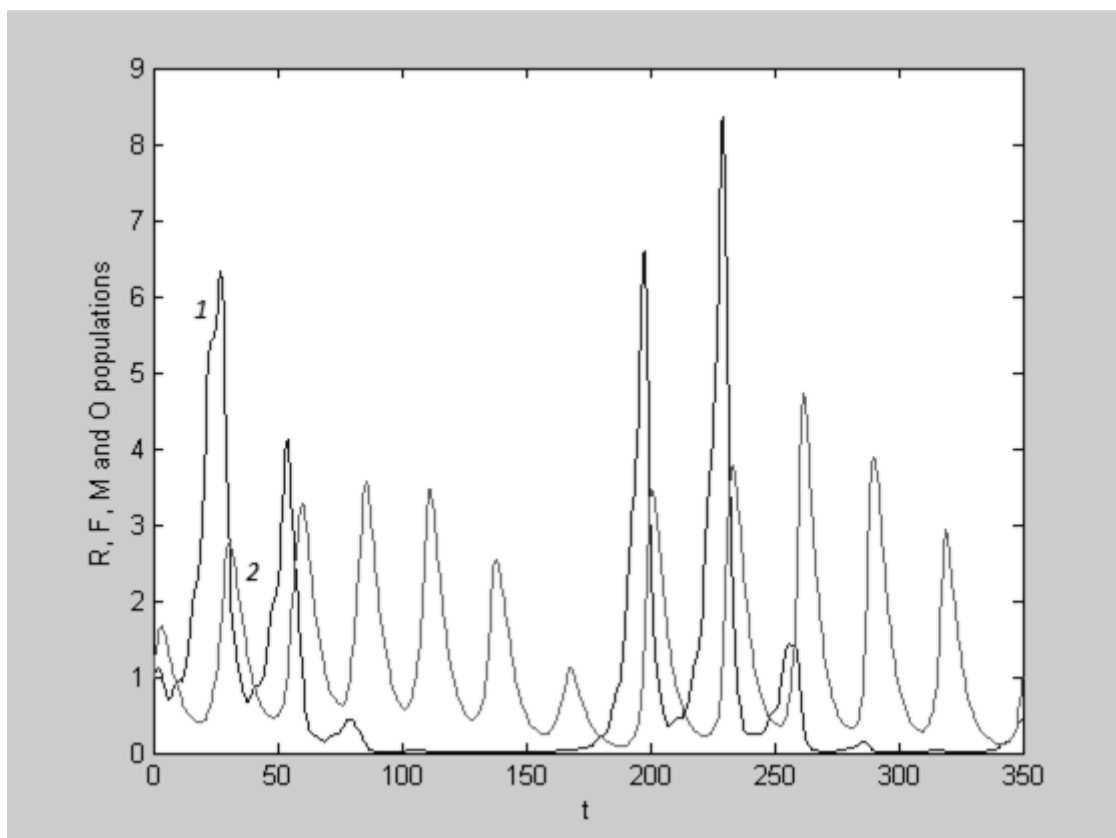


Рис. 22. Динамика системы популяций Кроликов 1, и Лис 2 в системе, где действуют еще и невидимки - Мыши и Совы, дожди и засухи.

Сравним с рисунком 18. Конечно, мы не можем ожидать количественного совпадения. Но качественные особенности реальной системы воспроизводятся. В этом смысле мы можем говорить о возросшей точности нашего прогноза поведения сложной системы. Теперь нам становится понятно, что на рисунке 18 не отражены многие факторы, влияющие на динамику системы. Там тоже есть какие-то невидимки. Понятно также, что эти невидимки не так влиятельны, как в нашей модели.

Теперь вернёмся к главной теме данной работы – к движущим силам и к путям эволюции. Конечно, мы, физики, не в силах проследить эволюцию биосферы с её многочисленными экосистемами. Но на примере очень простой экосистемы и её простой модели мы показали важный эволюционный факт.

Если целью эволюции является жизнь, её сохранение и дальнейшая эволюция, то необходимо найти такие пути развития, которые приведут к большому разнообразию форм живой материи. Без этого живая материя обречена либо на полную гибель в некоем случайном уголке Космоса, либо на множество периодов почти полного упадка и возрождения. Это и наблюдает палеобиология не нашей планете.

Можно догадаться, что этими же путями эволюция шла и при конструировании многоклеточных организмов с дифференциацией органелл их клеток, с разнообразием органов и, главное, с огромным числом разнообразных биохимических циклов.