

**МЕХАНИЗМЫ АВТОВОЛНОВОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ В ПРИРОДНО-АНТРОПОГЕННЫХ ЭКОСИСТЕМАХ**

Сидорова А.Э., Левашова Н.Т., Мельникова А.А., Дерюгина Н.Н., Семина А.Е.  
ФГАОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»  
ул. Ленинские горы, 1, корп. 2, г. Москва, 119991, Россия

*e-mail: sky314bone@mail.ru, natasha@npanalytica.ru, melnikova@physics.msu.ru, derunat@gmail.com, syoanya@yandex.ru*

**Аннотация.** Рассмотрена пространственно-временная модель природно-антропогенных экосистем, как суперпозиции активных сред, учитывающая неоднородности антропогенных и природных факторов. Подход направлен на выявление механизмов и пороговых значений управляющих параметров. Термодинамическая неравновесность, нелинейность, бифуркационное развитие - синергетическая база самоорганизации подобных экосистем в моделях активных сред. Особенности формирования природно-антропогенных экосистем состоят в наличии распределенного ресурса (энергии, вещества, информации) и источников воздействия, модулирующих системные процессы; в сопряжении природных и антропогенных подсистем, динамика которых определяется взаимодействиями прямых и обратных связей. Управляющими параметрами являются природные и антропогенные факторы (возбудимые элементы), формирующие длину и форму автоволн. Скорости природных процессов много меньше скоростей антропогенных процессов, поэтому антропогенные процессы в данной модели полагаем активаторами, а природные – ингибиторами общесистемных процессов. В изучаемых экосистемах как неоднородных активных средах возможно возникновение подпороговых взаимодействий соседних элементов. Модель позволяет качественно оценить пороговые и подпороговые условия распространения автоволнового процесса в зависимости от интенсивности источников воздействия, расположения возбудимых, слабовозбудимых и невозбудимых зон, наличия латентных источников автоволн, конкретно, численности и плотности населения и от других факторов.

**Ключевые слова:** самоорганизация, активные среды, автоволны, природно-антропогенные экосистемы, урбозекосистемы, внутренний переходный слой

**MECHANISMS OF AUTOWAVE SELF-ORGANIZATION IN NATURAL-ANTHROPOGENIC ECOSYSTEMS**

Sidorova A.E., Levashova N.T., Melnikova A.A., Deryugina N.N., Semina A.E.  
M.V. Lomonosov Moscow State University,  
Leninskiye Gory, 1, bld. 2, Moscow, Russia

*e-mail: sky314bone@mail.ru, natasha@npanalytica.ru, melnikova@physics.msu.ru, derunat@gmail.com, syoanya@yandex.ru*

**Abstract.** A spatial-temporal model is proposed that considers natural-anthropogenic ecosystems as a superposition of active media and takes into account the heterogeneity of anthropogenic and natural factors. The goal of the approach is to reveal mechanisms of their functioning and critical values of control parameters. Self-organization of such ecosystems in models of active media is considered on a synergistic basis of nonequilibrium thermodynamics, nonlinearity, and bifurcational development. Formation of natural-anthropogenic ecosystems is notably characterized by the presence of a distributed resources (energy, matter, information) and sources of influence that modulate system processes, as well as by complex dynamics of conjugated natural and anthropogenic subsystems determined by interactions of direct influences and feedbacks. The control parameters are natural and anthropogenic factors (excitable elements) forming the length and shape of autowaves. The rates of natural processes being much less than those of anthropogenic processes, the anthropogenic and natural processes in this model are considered as activators and inhibitors of system-wide processes, respectively. In the ecosystems, considered here as inhomogeneous active media, subthreshold interactions of neighboring elements are possible. The model allows for qualitative evaluation of threshold and subthreshold propagation of the autowave process in dependence on the intensity of sources, locations of excitable, weakly excitable, and non-excitable zones, existence of latent sources of autowaves, which, specifically, are population size and density, and other factors.

**Keywords:** self-organization, active media, autowaves, natural-anthropogenic ecosystem, urban ecosystem, internal transition layer

Природно-антропогенные экосистемы – это экосистемы, которые могут быть рассмотрены в качестве взаимодействующих подсистем – природной и антропогенной. Данный вид экосистем, в отличие от природных, характеризуется высокой скоростью роста, активным энерго- и массообменом, значительной средней плотностью народонаселения и высокой интенсивностью метаболизма. Эти условия нарушают динамическое равновесие потоков энергии, вещества и информации, снижают «буферную емкость» природных подсистем и приводят к неустойчивости общесистемных процессов. В результате, эволюционно сформировался новый тип нелинейных многофакторных экосистем, с большим трудом поддающихся математическому моделированию. Но даже упрощенные модели, базирующиеся на разумных междисциплинарных посылах, позволяют осмыслить принципиальные особенности динамики природно-антропогенных экосистем. Теоретической базой

представляемого системного анализа является анализ устойчивости природно-антропогенных экосистем на основе синергетических представлений об автоволновой самоорганизации в сопряженных активных средах [1].

Необходимой предпосылкой возникновения эффекта самоорганизации в границах природно-антропогенных экосистем является синергетическое соответствие природных факторов масштабам антропогенного воздействия. Для природно-антропогенных экосистем характерны общие закономерности многоплановых перекрестных антропогенных воздействий, генерируемых территориально связанными промышленными и жилыми объектами, фрагментированность антропогенных воздействий и геобиоценозов. В случае доминирования природных процессов экосистема способна к естественной автоволновой самоорганизации, а в случае значительного доминирования антропогенных процессов система приходит в неустойчивое состояние, и возникают необратимые системные процессы [2-4]. Взаимодействие сопряженных подсистем в общей распределенной активной среде позволяет учитывать экологически опасные антропогенные воздействия и способности к естественной самоорганизации городских геобиоценозов.

Нелинейным взаимодействиям в открытых системах свойственны дальнедействующие корреляции, амплитуды которых растут по мере приближения к точке бифуркации и тем самым переводят систему через этап статистической независимости к когерентной согласованности элементов. Этот процесс связан с зависимостью управляющих параметров экосистемы от структуры и свойств подсистем и наоборот. И чем сложнее структура экосистемы, тем сложнее функциональные взаимодействия и тем большему количеству перемежающихся стационарных устойчивых и неустойчивых состояний одновременно может быть подвержена система (мультистабильность). Поэтому в нелинейных открытых неравновесных системах, к которым относятся природно-антропогенные экосистемы, малые флуктуации способны развиваться в «гигантские», образуя диссипативные структуры. При этом наибольшее количество прямых и обратных связей приходится на долю природной подсистемы как более стабильной структуры, положительные обратные связи, в основном, наблюдаются на подсистемном уровне, а отрицательные – между подсистемами, что лимитирует структурно-функциональные возможности системы в целом [2-4]. Порог устойчивости природно-антропогенных экосистем связан с суперпозицией флуктуаций в неравновесных открытых системах. За счет прямых и обратных связей в общей системе возможны следующие основные варианты развития эффекта:

- усиление антропогенного воздействия способствует формированию самоподдерживающегося и распространяющегося возбуждения среды, и доминирующий водитель ритма способен со временем захватить все пространство, что приводит, как правило, к необратимым системным процессам.
- ослабление автоволнового фронта, приводящее к его разрыву или уничтожению, и система способна к естественной автоволновой самоорганизации.

Цель создания модели состоит в выявлении механизмов функционирования экосистемы на базе модифицированной авторами системы уравнений Фитц-Хью-Нагумо [5]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon D_u \Delta u = -\frac{1}{\varepsilon} (u(u - \alpha)(u - 1) + uv), \quad \frac{\partial v}{\partial t} - \varepsilon D_v \Delta v = (-\gamma v + \beta u), \quad (1)$$

где  $u$  – функция интенсивности активатора (антропогенных процессов);  $v$  – функция интенсивности ингибитора (природных процессов).

В качестве активаторов системных процессов можно рассматривать техногенные электромагнитные излучения, коррозию подземных сооружений и коммуникаций, изменение температуры, кислотности (рН) и окислительно-восстановительный потенциал (Еh) подземных вод, акустические и вибрационные нагрузки на верхний слой литосферы, рост концентрации тяжелых металлов в биогенном веществе, численность и плотность населения и т.д. В качестве ингибиторов – удельное электрическое сопротивление и возрастание/уменьшение плотности и влажности почво-грунтов, скорость течения и перемешивания подземных вод, площадь природного каркаса и т.д. Слагаемое  $uv$ , добавленное авторами в правую часть первого уравнения системы (1), расширяет возможности анализа перекрестных взаимодействий активатора и ингибитора.

$\alpha$  – параметр активации системы (обратно пропорционален плотности населения).

$\gamma$  – кинетический параметр затухания потенциала ингибитора,  $\gamma > 0$ .

$\beta$  – кинетический параметр взаимодействия активатора и ингибитора,  $\beta > 0$ .

$D_u, D_v$  – коэффициенты диффузии активатора и ингибитора,  $0.1 < \varepsilon D_u < 1$ ;  $0.01 < \varepsilon D_v < 0.1$ .

$\varepsilon$  – параметр, характеризующий скорость распространения активатора ( $0 < \varepsilon < 1$ ), отражает значительное различие скоростей изменения функций интенсивности активатора и ингибитора [6].

Для численного решения нелинейного уравнения используется линеаризация Ньютона с последующим применением метода последовательных приближений.

Если кинетический параметр  $\beta$ , отвечающий за связь функции ингибитора  $v$  с функцией активатора  $u$  достаточно мал, то с течением времени всплеск расплывается до верхнего порогового значения, занимая всю расчетную область (рис.1-а). С увеличением параметра  $\beta$  растет вероятность провала и затухания автоволнового фронта активатора (рис.1-б). В зависимости от соотношения параметров  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , многочлен в правой части первого уравнения (1) может иметь либо три вещественных корня – возбудимая среда, либо один вещественный корень, равный нулю. В такой системе любая начальная флуктуация затухает со временем: природные факторы способны ингибировать негативные антропогенные процессы – невозбудимая среда. В случае такого соотношения параметров  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , при котором модель описывает возбудимую среду, решение системы (1) имеет вид автоволны.

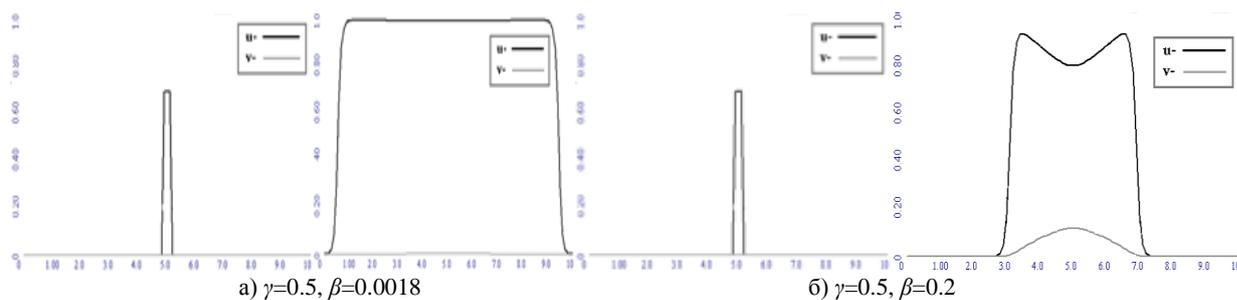


Рисунок 1 – Динамика автоволнового фронта в зависимости от значения кинетического параметра взаимодействия активатора и ингибитора ( $\beta$ ): а) «расплывающийся» всплеск активатора; б) «провал» всплеска активатора.  $\varepsilon=0.1, D_u=0.25, D_v=0.06$ . Черным цветом обозначена функция ингибитора, серым – активатора

График зависимости  $\alpha_c(\beta/\gamma)$  представлен на рисунке 1. При  $\alpha(\beta/\gamma) > \alpha_c(\beta/\gamma)$  система (1) описывает невозбудимую среду, при  $\alpha(\beta/\gamma) < \alpha_c(\beta/\gamma)$  – возбудимую.

Неоднородность распределения невозбудимых и возбудимых зон в системе определяется её структурно-функциональной сложностью, связанной с наличием сети прямых и обратных связей, а также барьеров (геобиоценозов) – областей пространства активной среды, в которой фронт волны активатора нивелируется при ширине барьера большей, чем ширина переходного слоя (запирание автоволны). При меньшей ширине барьера происходит туннелирование через барьер (см. рис. 3-4) [2, 3]. Соотношение коэффициентов  $\alpha, \beta, \gamma$  в зоне барьера в нашем случае соответствует области невозбудимой среды на диаграмме (см. рис. 2).

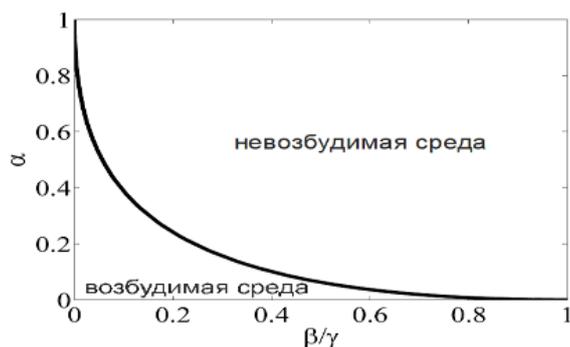


Рисунок 2 – Диаграмма состояния активной среды в зависимости от соотношения параметров  $\alpha, \beta, \gamma$

Параметры системы представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Параметры задачи, принятые для описания барьера в экосистеме

$\varepsilon$	$D_u$	$D_v$	$\alpha$	$\gamma$	$L$	$\beta/\gamma$ вне барьера	$\beta/\gamma$ в области барьера
0.04	5	1	0.1	0.5	25	0.02	1.4

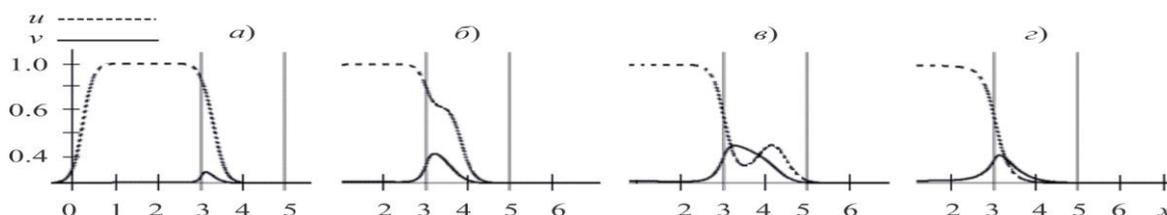


Рисунок 3 – Эффект записывания импульса активатора: а), б), в) – стадии процесса, з) – установившееся стационарное распределение. Ширина барьера  $2L/25$ . Положение барьера отмечено вертикальными линиями

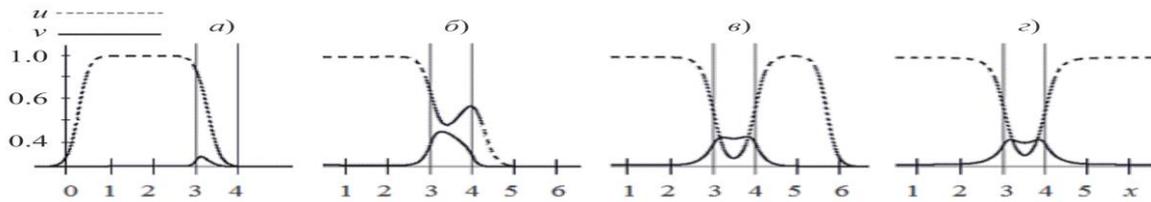


Рисунок 4 – Эффект туннелирования импульса активатора: а), б), в) – стадии процесса, з) – установившееся стационарное распределение. Ширина барьера  $L/25$ . Положение барьера отмечено вертикальными линиями

Рассмотренные эффекты поведения автоволнового процесса связаны с синергизмом воздействий на экосистему различных факторов: фрагментированности и площади биоценозов, их количественного и качественного состава, плотности размещения промышленных и жилых объектов, различного рода антропогенных факторов (как результата функционирования промышленных и жилых объектов), численности и плотности населения и др., что ограничивает буферную емкость природных подсистем и устойчивость экосистемы в целом.

Численность и плотность населения являются важным фактором формирования антропогенных процессов в природно-антропогенных экосистемах и особенно в урбозэкосистемах (УЭС), в границах которых проживает около 60 % населения Земли. При этом мегаполисы, например, не способны самостоятельно обеспечить оптимальные условия естественной самоорганизации (воспроизводство основных компонентов природной среды, обеспечивающее баланс вещества и энергии в системе) и, следовательно, компенсаторное соответствие устойчивости природной подсистемы уровню антропогенного воздействия. В значительной степени это связано с высокой плотностью и численностью населения, что, в свою очередь, определяет повышенную интенсивность потоков энергии, вещества и информации в общей системе, снижает «буферную емкость» природных подсистем, увеличивает нелинейность и неустойчивость системных процессов. Это влечет увеличение взаимовлияния элементов в системе и возможных постбифуркационных траекторий развития.

В рамках рассматриваемой модели были рассмотрены два основных типа формирования плотности населения в УЭС: по Гауссу и «пятнистая» – суперпозиция двух распределений Гаусса с различными центрами, характерная для больших городов. В последнем случае максимумы функции распределения плотности расположены в точках с координатами  $x=x_i, i=1,2$ . (см. табл. 2, рис. 5).

Для одномерной задачи в модели (1) вводится равномерная сетка на отрезке  $[-L;L]$ , где  $L$  – ширина расчётной области [7], а распределение плотности задается функцией:

$$\rho = \rho_0 \left( \exp(-\eta(x - x_1)^2 / 2) + \exp(-\eta(x - x_2)^2 / 2) \right), \tag{2}$$

где  $\eta = \frac{2}{d^2} \ln \frac{\rho_0}{\rho_d} = \frac{2}{d^2} \ln \frac{\alpha_0}{\alpha_d}$ ;  $\rho_0 = \alpha_0^{-1}$  – плотность в максимуме;  $\rho_d = \alpha_d^{-1}$  – плотность на расстоянии  $d$  от

максимума:  $\rho(x_i \pm d) = \rho_d$ . Параметры системы представлены в таблице 2.

Анализ графика в случае более одного пика плотности населения показывает, что в системе отмечается формирование автоволн как активатора, так и ингибитора. С течением времени распределение становится стационарным.

В случае мозаичности пространственного распределения возбудимых и невозбудимых зон на границах этих зон происходит резкое изменение функций интенсивностей активатора и ингибитора. В этом случае говорят, что на границах зон формируются внутренние переходные слои. Анализ условий существования стационарного переходного слоя, полученных при заданном выражении для  $\alpha(x) = \rho^{-1}(x)$  [8] показывает, что для

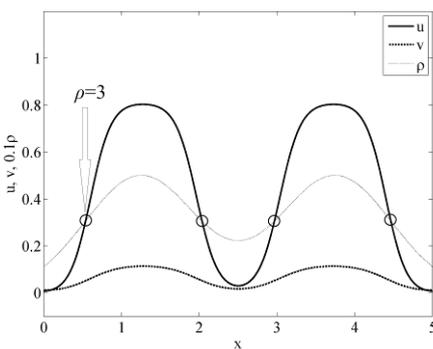


Рисунок 5 – График зависимости функций активатора, ингибитора, распределения плотности населения от координаты  $x$  при  $\Delta x/d=2$  (одномерная модель): установившееся стационарное распределение

образования устойчивого стационарного решения с внутренним переходным слоем определяющую роль играет величина отношения  $\Delta x/d$ .

В возбудимой среде условием существования переходных слоев между пиками при значениях параметров  $\alpha_0$  и  $\alpha_d$  (см. табл. 2) является  $\Delta x/d \geq 1.8$ . Величине  $\Delta x/d = 1.8$  соответствует значение  $\alpha = 0.336$ . Это значение параметра  $\alpha$  играет роль критического:

согласно предложенной модели при  $\alpha > 0.336$  формируется городская среда с устойчивой во времени и пространстве локализацией. При  $\Delta x/d = 2$  (см. рис. 5)

решение имеет четко выраженные внутренние переходные слои при  $\rho = \frac{1}{0.336}$ ; 3, локализованные между точками

$x_1$  и  $x_2$ .

Таблица 2 – Параметры одномерной задачи для описания УЭС с «пятнистой» плотностью населения ( $\Delta x = x_1 - x_2$  – расстояние между максимумами функции распределения плотности населения)

Управляющие параметры системы уравнений (1)					Параметры функции распределения $\rho(x)$					
$\varepsilon$	$\gamma/\beta$	$Du$	$Dv$	$L$	$\alpha_0$	$\alpha_d$	$d$	$x_1$	$x_2$	$\Delta x/d$
0.04	6,7	5	1	5	0.2	0.9	0.25L	0.25L	0.75L	2

Все приведенные выше рассуждения имеют место и для двумерных моделей, разработанных на базе системы уравнений (1). [9]. Численное решение двумерной задачи проводится в прямоугольнике  $-L \leq x \leq L$ ;  $-L \leq y \leq L$ , в котором вводится равномерная сетка. Реализация численного счета производится при помощи схемы переменных направлений [7].

На рисунке 6 и в таблице 3 представлен результат численного эксперимента для двумерного случая с «пятнистой» плотностью населения:  $\rho = \rho_0 \left( \exp\left(-\frac{\eta}{2}\left((x-x_1)^2 + y^2\right)\right) + \exp\left(-\frac{\eta}{2}\left((x-x_2)^2 + y^2\right)\right) \right)$

и начальным распределением  $u_0(x, y) = \exp\left(-15\left((x-x_1)^2 + y^2\right)\right) + \exp\left(-15\left((x-x_2)^2 + y^2\right)\right)$ ,  $v_0 = 0$ .

Таблица 3 – Параметры двумерной задачи для описания УЭС с «пятнистой» плотностью населения

$\varepsilon$	$\gamma$	$\beta$	$Du$	$Dv$	$L$	$d$	$\Delta x =  x_2 - x_1 $	$\Delta x/d$	$\rho_0$	$\rho_d$
0.007	1	0.15	5	1	2	0.3L	0.4L	1.3	5	1.1

Представленный в работе подход дает возможность, даже при наличии минимального количества управляющих параметров, получения адекватной оценки взаимодействия антропогенных и природных воздействий в возбудимой среде природно-антропогенных экосистем – сложных нелинейных структур, которые сопрягают различающиеся на порядки величин масштабы систем и событий. Управление параметрами автоволновой среды посредством внесения локальных воздействий может иметь широкие перспективы, поскольку способно влиять на макроскопическую картину автоволновой динамики самоорганизации в природно-антропогенных экосистемах.

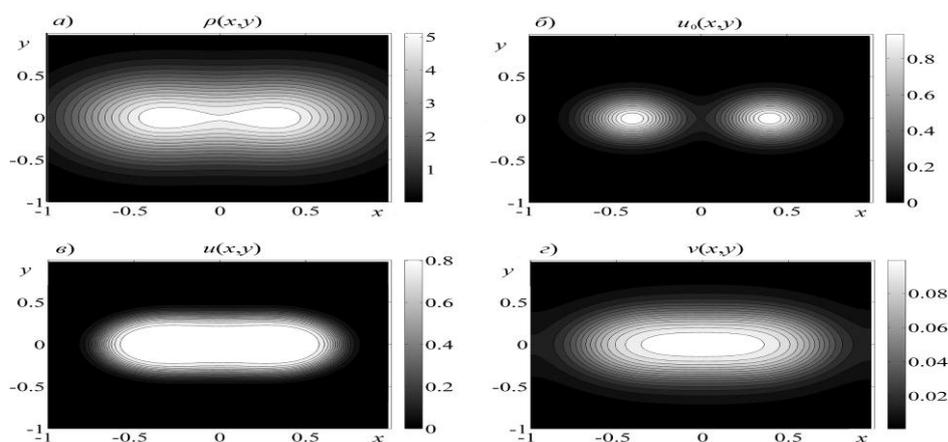


Рисунок 6 – График зависимости плотности населения и функций интенсивности активатора и ингибитора от координат  $x, y$  (двумерная модель): а) стационарное распределение плотности населения, б) начальное распределение функции интенсивности активатора, в) стационарное распределение функции интенсивности активатора, г) стационарное распределение функции ингибитора

**Список литературы / References:**

1. Твердислов В.А., Сидорова А.Э., Яковенко Л.В. *Биофизическая экология*. М.: УРСС КРАСАНДР, 2011, 544 с. [Tverdislov V.A., Sidorova A.E., Yakovenko L.V. *Biophysical ecology*. М.: URSS KRASANK, 2011, 544 p. (In Russ.)]
2. Сидорова А.Э., Мухартова Ю.В., Яковенко Л.В. Урбоэкосистемы как суперпозиция сопряженных активных сред. *Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия*, 2014, № 5, с. 29-35. [Sidorova A.E., Mukhartova Y.V., Yakovenko LV. urban ecosystem as a superposition of conjugated active medium. *Bulletin of Moscow University. Ser. 3. Physics. Astronomy*, 2014, vol. 5, pp. 29-35. (In Russ.)]
3. Сидорова А.Э., Мухартова Ю.В. Пространственно-временная модель урбоэкосистем как сопряженных активных сред. *Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия*, 2013, № 5, с. 65-70.

[Sidorova A.E., Muhartova V.Y. Spatial-temporal model of the ecosystems of the conjugated active medium. *Bulletin of Moscow University. Ser. 3. Physics. Astronomy*, 2013, vol. 5, pp. 65-70. (In Russ.)]

4. Сидорова А.Э., Левашова Н.Т., Мельникова А.А., Яковенко Л.В. Популяционная модель урбоэкосистем в представлениях активных сред. *Биофизика*, 2015, т. 60, вып. 3, с. 574-582. [Sidorova A.E., Levashova N.T., Melnikova A.A., Yakovenko L.V. A model of a human-dominated urban ecosystem as an active medium. *Biophysics*, vol. 60, no. 3, pp. 466-473. (In Russ.)]

5. FitzHugh R.A. Impulses and physiological states in theoretical model of nerve membrane. *Biophys. J.*, 1961, vol. 1, p. 445-466.

6. Савенко В.С. *Геохимические аспекты устойчивого развития*. М.: ГЕОС, 2003, 180 с. [Savenko V.S. *Geochemical aspects of sustainable development*. М.: GEOS, 2003, 180 p. (In Russ.)]

7. Калиткин Н.Н., Корякин П.В. *Численные методы: в 2 кн. Методы математической физики*. М: Издательский центр «Академия», 2013, 303 с. [Kalitkin N.N., Koryakin V.P. *Numerical methods: in 2 kN. Methods of mathematical physics*. М: Publishing center «Academy», 2013, 303 p. (In Russ.)]

8. Бутузов В.Ф., Левашова Н.Т., Мельникова А.А. Контрастная структура типа ступеньки в сингулярно возмущенной системе уравнений с различными степенями малого параметра. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2012, т. 52, № 11, с. 1983-2003. [Butuzov V.F., Levashova N.T., Melnikova A.A. Contrast the structure type of the step in a singularly perturbed system of equations with different powers of the small parameter. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2012, vol. 52, no. 11, pp. 1983-2003. (In Russ.)]

9. Бутузов В.Ф., Левашова Н.Т., Мельникова А.А. Контрастная структура типа ступеньки в сингулярно возмущенной системе эллиптических уравнений. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2013, т. 53, № 9, с. 9-29. [Butuzov V.F., Levashova N.T., Melnikova A.A. Contrast the structure type of the step in a singularly perturbed system of elliptic equations. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2013, vol. 53, no. 9, pp. 9-29. (In Russ.)]

#### АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ МОЛЕКУЛ В ФОТОСИСТЕМЕ II ЦИАНОБАКТЕРИЙ

Фатхуллин Б.Ф., Габдулхаков А.Г.

ФГБУН Институт белка РАН

ул. Институтская, 4, г. Пуццоно, 142290, РФ

e-mail: azat@vega.protres.ru

**Аннотация.** В тилакоидах цианобактерий, а также в других фотосинтезирующих организмах образование молекулярного кислорода с использованием энергии света осуществляет липид-пигмент-белковый комплекс, называемый фотосистемой II (ФСII). Кислород-выделяющий комплекс расположен в глубине люменальной части ФСII, и молекулам воды, чтобы попасть в активный центр, и молекулам диоксида, чтобы освободить активный центр фермента, необходимо преодолеть белковое окружение. Предыдущие исследования по выявлению кислородных и водных каналов в ФСII основаны либо на анализе полостей внутри ее статической структуры, либо на экспериментах по внедрению молекул благородных газов в кристаллы ФСII под давлением. Это позволило определить некоторые возможные пути выхода молекул, а также статические положения молекулярного кислорода.

В данной работе проведено моделирование движения молекул воды и кислорода в транспортной системе ФСII методом молекулярной динамики. Разработана программа и предложены критерии для автоматизации процесса анализа молекулярно-динамических траекторий движения молекул внутри фотосистемы II.

**Ключевые слова:** фотосистема II, молекулярная динамика