

С. Я. ФРЕНКЕЛЬ И. М. ЦЫГЕЛЬНЫЙ Б. С. КОЛУПАЕВ

С. Я. ФРЕНКЕЛЬ
И. М. ЦЫГЕЛЬНЫЙ
Б. С. КОЛУПАЕВ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ КИБЕРНЕТИКА



С. Я. ФРЕНКЕЛЬ
И. М. ЦЫГЕЛЬНЫЙ
Б. С. КОЛУПАЕВ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ КИБЕРНЕТИКА

Л Ь В О В
ИЗДАТЕЛЬСТВО «СВИТ»
1 9 9 0

Молекулярная кибернетика / Френкель С. Я., Цыгельный И. М., Колупаев Б. С. — Львов: Свит, 1990. 168 .
ISBN 5-11-000610-5.

В монографии изложены принципы новой, быстро развивающейся области науки на стыке коллоидной химии, физико-химической механики материалов, физической химии полимеров, технологии полимеров и собственно кибернетики — молекулярной кибернетики. Отправляясь от «технологии» образования паутины в природе и самоорганизации макромолекул глобулярных белков, авторы вводят представление о конфигурационной информации, содержащейся в любых макромолекулах, которое предопределяет направления образования различных морфологий на разных уровнях структурной организации и позволяет определять пути получения материалов с заданными свойствами. Рассмотрено также приложение принципов молекулярной кибернетики к проблеме эволюции биологических систем. Приведены сведения о современных методах, используемых в молекулярной кибернетике: теории бифуркаций, катастроф, термодинамике открытых систем.

Для преподавателей, аспирантов, научных работников, инженеров, студентов физических и химических специальностей.

Ил. 72. Табл. 6. Библиогр.: 136 назв.

Рецензент д-р техн. наук, проф. *В. М. Коликов*
(Ленинград. политехн. ин-т)

Редакция научно-технической
и природоведческой литературы
Редактор *Л. А. Азиян*

1901000000—035
Ф М225(04)—90 21—90

ISBN 5-11-000610-5

© Френкель С. Я., Цыгельный И. М.,
Колупаев Б. С., 1990

В настоящее время наука начала переходить от безудержной специализации к обобщению, осознанию того, что все виды физических, химических и других явлений по сути своей представляют те или иные разновидности ограниченного количества законов. Вместе с тем это уже не совсем те законы, которые излагали принципы функционирования физических или других систем с точки зрения зависимости одного-двух параметров от небольшой группы факторов, при нашем молчаливом согласии, что остальное множество факторов в момент опыта постоянно. Несомненно, такие исследования необходимо проводить для получения воспроизводимых точек отсчета для описания сложных систем. Однако мы живем в мире, где на самом деле множество существующих факторов взаимодействует синергически, с результатом, который нелегко предсказать. С этой точки зрения особую важность представляют системные исследования, в которых различного рода эффекты рассматривают, выделяя структуры системы, иерархии ее подсистем и др. Именно таким образом подходят к изучению молекулярных систем авторы монографии. Особо следует подчеркнуть проводимый ими на протяжении всего изложения тезис о том, что алгоритм технологии изготовления и использования материалов должен быть основан на глубоком изучении их внутренних свойств — конфигурационной информации макромолекул в полимерах, информационных свойств надмолекулярных образований и т. п. Совершенно справедливо авторы называют «антитехнологией» такую технологию, которая не использует информацию, содержащуюся на различных уровнях иерархии молекулярных систем. Материалы и вещества должны применяться в соответствии с той структурной и конфигурационной информацией, которая в них содержится и проявляется через химические реакции их активных функциональных групп, различные физико-химические взаимодействия их активных центров и др. Любые альтернативы этому подходу ведут к неоправданно высоким затратам энергии, топлива, что в наше время непростительно.

Представляют интерес разнообразные аналогии, проведенные авторами при описании далеко отстоящих друг от друга систем. Ведь методы исследования, скажем динамики популяций животных, существуют длительное время со своими сложившимися атрибутами, математическим аппаратом, внутренней логикой. Активно исследуется и динамика развития молекулярных конгломератов. С множеством результатов математического моделирования, экспериментов. Авторы показывают, что многие установившиеся ме-

тоды описания конкретных систем можно путем аналогий переносить в иные системы, использовать для прогнозирования их поведения. Такой подход, вообще говоря, характерен для современной науки. Определенным итогом подобного обобщения является, по-видимому, общая теория систем в ее современном состоянии, отдельные элементы которой используются в данной монографии. Однако авторы применяют и более конкретные методы, в том числе теорию бифуркаций, катастроф, неравновесную термодинамику.

Думается, что для читателя будут полезны проводимые основы создания высокопрочных полимеров, достаточно проработанные теоретически и экспериментально. Такие полимеры уже начали находить применение в промышленности. Однако процесс их получения должен опираться на солидную научную основу. Хочется также подчеркнуть, что проводимая авторами линия на внедрение «кибернетической» базы разработки полимерных материалов приобретает особое значение в условиях повсеместного внедрения средств автоматизации технологических процессов на базе ЭВМ.

Академик АН УССР Р. В. КУЧЕР

ПРЕДМЕТ МОЛЕКУЛЯРНОЙ КИБЕРНЕТИКИ

Ни в одном энциклопедическом словаре или справочнике словосочетания «молекулярная кибернетика» не найдешь. Усложняет ситуацию тот факт, что и само понятие *кибернетика* имеет множество подчас противоречивых определений. Будем руководствоваться одним из них [1], согласно которому кибернетика — наука об общих законах получения, хранения, передачи и переработки информации. Основной объект исследования — так называемые кибернетические системы, рассматриваемые абстрактно, вне зависимости от их материальной природы.

Отдельные разделы кибернетики представляют собой самостоятельные научные направления.

Теоретическая основа кибернетики — теории информации, алгоритмов, автоматов, исследование операций, теории оптимального управления и распознавания образов и др. Рассматривая экспериментальные и практические аспекты кибернетики, мы добавили бы еще и бионику, трактуемую в [1] как одно из направлений кибернетики, поскольку она имеет однозначное определение. На основе этого нетрудно определить молекулярную бионику как часть молекулярной кибернетики, отправляясь от молекулярной биологии или таких ее разделов, как молекулярная биофизика или молекулярная генетика.

Попытки именно такого определения, причем основанные на принципах записи и передачи информации, были сделаны в работах [2, 3]. Ниже мы остановимся на формальных и количественных принципах описания и оценки информации, а пока ограничимся ее определением как способа записи, хранения и передачи неких признаков от одной системы к другой. Отметим, что это могут быть системы разной степени сложности, даже если исчислять эту сложность общим числом и числом разновидностей «элементарных» компонентов. Аналог второго начала термодинамики тут не имеет силы: более простые системы могут передавать инфор-

мацию и определяющим образом влиять на более сложные. Мрачный пример начала злокачественного роста в этом плане весьма убедителен.

Было бы неправильно не принимать во внимание, что в принципе может существовать несколько молекулярных кибернетик — в зависимости от того, какой из рассмотренных выше компонентов кибернетики низводится до молекулярного уровня. (В неявной форме это уже наиболее общее и абстрактное определение молекулярной кибернетики). В принципе все эти кибернетики равноправны, но мы уделили значительное внимание той из них, которая наиболее наглядна (в той мере, в какой кибернетика вообще может быть наглядной) и которую можно было бы назвать макромолекулярной (или полимерной) кибернетикой. Роль бионики становится понятной уже на данной стадии изложения, поскольку можно без труда догадаться, что отдельные наши построения будут основываться на некоторых общих свойствах биологических и синтетических макромолекул.

Однако зачем вообще потребовались макромолекулы? Для объяснения воспользуемся логическим построением «от противного». В современном житейском представлении кибернетика так или иначе связана с ЭВМ. Хорошо известно, что деятельность ЭВМ зависит от совокупности электронных контуров, которые в машинах первых поколений реализовывались на электронных лампах (большие ЭВМ были величиной с дом), затем — на транзисторах, действующим началом которых были гетеропереходы, затем — на кристаллах с теми же гетеропереходами. При этом оказалось, что всю информацию выгоднее записывать на цифровой основе, в двоичной системе. Соответственно мы не касаемся аналоговых ЭВМ, возможности которых значительно ограниченнее, чем цифровых, хотя с позиций бионики они могут иметь отдельные специфические удобства.

При переходе от ламп к транзисторам и далее к кристаллам происходила миниатюризация ЭВМ и одновременно возникали возможности существенного увеличения количества элементов в каждом их блоке. Бурный прогресс химии позволяет уже сегодня поставить задачу перехода от мини-ЭВМ, работающих на кристаллах, к микро-ЭВМ, где роль транзисторов выполняют единичные, достаточно сложные (но не полимерные!) молекулы с контролируемой структурой. Преимущество макромолекулярных систем — возможность осуществления кодирования в них информации на основе многозначной логики.

По-видимому, на таком уровне структуры помехи, связанные с тепловым движением, невелики, хотя вызванные космическими лучами могут оказаться опасными. Впрочем, обычно технические сложности такого рода преодолевают, и в недалеком будущем можно ожидать появления подобных «молекулярно-электронных» микро-ЭВМ.

Однако существует совершенно иной принцип записи, передачи и реализации информации, тоже обусловленный структурой мо-

лекул и изменениями их состояния, но возникший в результате эволюции биосферы нашей планеты.

Дело в том, что на любой линейной (не только линейной, но это сложнее) полимерной молекуле может быть записана некая информация — «текст» — по аналогии с тем, как раньше на телеграфной ленте с помощью азбуки Морзе записывали «линейную» информацию или в настоящее время записывают ее на магнитофонной или видеомэгнитофонной ленте. Разумеется, в первом случае прочтение сообщения не требует специальных устройств, а во втором — нуждается в сложной радиоэлектронной системе (при этом забывают, что телеграфист гораздо сложнее самой изысканной радиоэлектронной схемы).

Этот «текст» определяется числом и последовательностью звеньев (предполагается, что они различимы), из которых состоит макромолекула. На первый взгляд, то же «сообщение» можно было бы написать, расположив в нужном порядке обычные — малые — молекулы. Однако в этом случае тепловое движение быстро «стерло» бы это сообщение. Когда же элементарные звенья, образующие цепь макромолекулы, соединены ковалентно, запись оказывается практически «вечной» [4]. Иными словами, практически любая макромолекула является запоминающим устройством. С этим связано важное физическое свойство полимерных молекул — линейная память, благодаря которой макромолекулы могут очень сильно изменять свои размеры и форму, по существу, претерпевая фазовые переходы, а затем возвращаться в исходное состояние [5, 6]. С этой точки зрения макромолекулы представляют собой миниатюрные физические тела, описываемые в терминах термодинамики малых систем (как равновесной, так и неравновесной), т. е. систем, подчиняющихся основным закономерностям статистической механики, но с поправками на конечное (хотя и большое) количество составляющих их элементов [7].

Известно, что в растворе наиболее вероятное состояние гибкоцепной линейной макромолекулы — статистический клубок, в координационной сфере которого собственно полимера содержится всего около 1%; остальной объем занят растворителем. Но при конкретных условиях может произойти компактизация этих клубков до почти сплошных образований. Эти переходы, именуемые переходами клубок—глобула, напоминают, но в миниатюрном объеме, конденсацию пара и могут быть прерывными (первого рода) или непрерывными, в зависимости от термодинамической жесткости и исходных (линейных) размеров цепей.

В обычных синтетических системах эта конденсация происходит случайным образом и при прочих равных условиях может возникнуть очень большое количество дискретных «глобулярных» состояний. Однако в сложных уже на молекулярном уровне биологических системах события разворачиваются совсем по-иному (см. главу 2). Например, цепочки белковых (протеиновых) молекул состоят из примерно 20 типов звеньев, расположенных в строго опре-

деленной последовательности, отобранной в ходе и далее контролируемой генетически. Отдельные звенья объединены в полипептидную цепочку и содержат боковые группы различной полярности. Это уже составляет некоторую информацию о том, как поведет себя конкретная макромолекула в водной среде с определенной ионной силой и определенным рН. При наличии многих гидрофобных групп цепочка для снижения своей свободной энергии будет стремиться принять компактную форму, чтобы внутри оказались гидрофобные группы, а «растворимые» в воде полярные их экранировали.

Это только некая «статистическая» информация, из которой следует, например, что белки с большой концентрацией гидрофобных групп не предназначены (разумеется, эволюцией, а не творцом; понятие «предназначение» приобретает, таким образом, вполне объективный информационный и физико-химический смысл) быть элементами волокнистых (фибриллярных) систем, ибо в таких системах макромолекулы должны быть максимально развернуты.

Но вопрос о предназначении с этого лишь начинается. Функциональные боковые группы могут с различной интенсивностью взаимодействовать друг с другом, внося «коррекции» в компактизацию молекулы, если она к ней склонна. Могут возникать водородные, солевые и даже ковалентные связи между отдаленными вдоль цепи звеньями; напротив, при наличии, скажем, избытка зарядов одного знака (именно тут играют решающую роль рН и ионная сила) силы отталкивания между ними могут препятствовать компактизации.

Иными словами, последовательность аминокислотных остатков в макромолекулярной белковой цепи есть не просто некая запись, а программа поведения макромолекулы в определенных условиях.

Собственно с этого момента и можно говорить о предназначении систем. Даже простые организмы (способные к самовоспроизведению), в отличие от, скажем, вирусов, которым для самовоспроизведения необходимо попасть в живую клетку-носитель (или хозяина) содержат тысячи белков разных сортов, причем внутри каждого сорта макромолекулы строго идентичны — как в отношении «текста», так и, следовательно, поведения. Условно можно подразделить белки на такие группы: «строительные» — большей частью это фибриллярные белки, запасные, представляющие собой своего рода «кладовую» аминокислот для синтеза белков групп (примеры — яичный альбумин, глобулины семян растений, белок молока — казеин), и «энергетические», непосредственно осуществляющие обмен веществ.

«Энергетические» белки с полным основанием можно уподобить молекулярным машинам, выполняющим строго определенные функции — каталитическую, гормональную, переноса кислорода и т. д. Как правило, все эти молекулы содержат так называемый центр активности, непосредственно ответственный за выполнение ими своих «машинных» функций. Центр активности образован не-

сколькими далекими вдоль цепи звеньями, сблизившимися в результате единственно возможного способа пространственной сборки вначале линейной молекулы. При этом не следует думать, что остальная часть молекулы — просто инертный носитель или вовсе ненужная издержка эволюции. Обладая ограниченной подвижностью, эта «остальная часть» реагирует на любые внешние воздействия (температуру, pH, контакт с другими молекулами и т. п.) и тем самым регулирует дееспособность центра.

Все это делает макромолекулы «энергетических» белков подобием самособирающихся (не от нуля, а от линейной цепи) и саморегулирующихся автоматов. О формальном сходстве макромолекул и автоматов и возможности их одинакового описания уже в привычных терминах кибернетики речь пойдет дальше.

Мы привели в некотором роде крайний пример записи и реализации — путем «динамического самопрочтения» — информации на сложных макромолекулах, являющихся одновременно носителями и динамическими потребителями информации. Можно даже трактовать их как преобразователи информации в энергию, что, впрочем, характерно для любых генераторов энергии, поскольку информация об их предназначении заложена в них в процессе изготовления.

В этом заключается принципиальное отличие макромолекулярной кибернетики от того варианта, который был упомянут выше, где в роли транзисторов выступают сложные молекулы с контролируемой электронной структурой. Будучи «просто» транзисторами, они пассивны и сами по себе не способны к эволюции (вопрос о том, могут ли самостоятельно эволюционировать сделанные из них существующие в настоящее время микро-ЭВМ, из другой области, но ответ будет скорее всего отрицательным), поскольку они лишены способности к самостоятельному обмену с окружающей средой материей, энергией и в определенной мере информацией, т. е. не могут трансформировать информацию в материю или энергию. Иными словами, они не являются диссипативными структурами [8], в то время как некоторыми свойствами диссипативных структур обладают уже изолированные макромолекулы.

Принципиальная возможность макромолекул с функциональными боковыми группами к химической эволюции уже непосредственно следует из того, что на них записан «вечный» текст: молекулы полимера могут вступать в химические реакции с молекулами окружающей среды, не теряя при этом целостности (число звеньев основной цепи остается неизменным), но трансформируя «текст» (структура ряда мономерных звеньев усложняется) и тем самым увеличивая число способов (или совершенствуя один способ) динамического самопрочтения.

То есть достаточно сложные макромолекулы, уже обладающие некоторым запасом информации, могут, взаимодействуя с окружением, увеличивать этот запас информации. Это очень важный принцип, который можно вывести, не прибегая к методу индукции: чем сложнее система, чем больше она содержит информации, тем

больше у нее возможностей к дальнейшей эволюции и тем быстрее эта эволюция происходит. Вся история эволюции — «от первичного бульона» до техносферы (это термин, пожалуй, точнее, чем «ноосфера», но приоритет В. И. Вернадского в постулировании постбиосферной стадии эволюции Земли неоспорим) убедительно показывает это. Причем наиболее длительным был период молекулярной эволюции — от простых макромолекул до способной к самовоспроизведению клетки; с этим периодом связан известный парадокс коэффициентов [3], однозначно не разрешенный до сих пор.

Однако сформулированный принцип сохраняет силу и для молекулярной эволюции, а один из возможных выходов из парадокса коэффициентов заключается в пересмотре роли «осмотических клеток» (ссылки на них см. у А. И. Опарина [9]). Если допустить, что одновременно с макромолекулами возникли осмотические клетки, ограниченные от среды полупроницаемыми мембранами и обладающие большой подвижностью формы — как реакций на градиенты температуры, pH, концентрации разных ингредиентов «бульона», то на основании сформулированного принципа внутри таких протоклеток (и одновременно с ними) эволюция должна проходить в ускоренном темпе.

Исходя из приведенных выше рассуждений и стандартного определения кибернетики, получение, хранение, передача и переработка информации вполне реализуемы на уровне макромолекул, которые можно трактовать как «кибернетические системы». Каждый из перечисленных нами компонентов кибернетики тоже можно «привязать» к макромолекулам. Можно убедиться в этом, обратившись к любому курсу молекулярной биологии или биофизики.

Но если «переработка информации», основанная на динамическом самопрочтении, характерна для живых систем, то разные технологии переработки полимеров также трактуются как переработка информации, но уже в связи с такими компонентами кибернетики, как исследование операций и соответственно теория оптимального управления (технологическим процессом). Самый примитивный пример: нельзя получить химические волокна из некристаллизующихся или очень коротких, или сильно разветвленных цепей. Степени полимеризации, разветвленности и стереорегулярности становятся, таким образом, тоже информационными, хотя и статистическими понятиями.

Принцип «предназначения» сохраняется и для относительно простых макромолекул. Так, волокнами «предназначены» быть только достаточно высокомолекулярные, линейные и кристаллизующиеся полимеры. Отсутствие одного из этих информационных (или структурных, что в данном случае одно и то же) признаков делает всякие попытки получить волокна из соответствующих полимеров типичной «антитехнологией». Такой же антитехнологией будет попытка получить каучук или резину из жесткоцепного полимера: его макромолекулы неспособны к гигантским обратимым деформациям (т. е. просто разворачиванию клубков), представляю-

щим собой суть каучукоподобной эластичности. Но «предназначение» касается не только того, что можно, но и того, как следует обращаться с перерабатываемой системой, т. е. с выбором технологического процесса и его управлением.

Если ограничиться материаловедением, а не обработкой готовых материалов для придания им определенной формы или размеров (впрочем, в случае полимеров эти операции зачастую могут быть совмещены), то любой правильный технологический процесс связан с понижением энтропии системы на некоторую величину ΔS (т. е. с придачей системе некоторой дополнительной информации). Даже в простых системах конечному результату, или ΔS , могут соответствовать различные затраты энергии; естественно, что следует стремиться к развитию малоэнергоёмких процессов.

Для полимерной системы любое изменение структуры затрагивает не только взаимное расположение и способ упаковки молекул, как в простых системах, но и изменение конформаций самих макромолекул:

$$\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2,$$

где индекс «1» соответствует конформационной, а индекс «2» — конфигурационной (связанной с изменением взаимного расположения молекул) энтропии. Можно еще подразделить ΔS_2 на позиционный (расположение центров тяжести) и ориентационный термы, но это для нашего рассмотрения не обязательно. Существенно, что в приведенном соотношении доминирует терм ΔS_1 , связанный с записанной на макромолекулах информацией. Парадоксально, что мы умеем сегодня читать генетический код — одну из самых сложных и детальных форм молекулярной записи информации, но довольно плохо пользуемся статистической информацией (связанной все с тем же предназначением), которую сами записываем на синтетических макромолекулах [3].

Например, можно показать, что любые макромолекулы по достижении некоторой степени развернутости, порядка 25% (причем неважно, каким способом эта степень развернутости достигнута), далее уже не требуют энергии (если не считать преодоления вязкости системы) для их дальнейшего разворачивания [3]. Поэтому при получении волокон из расплава достаточно растянуть струю примерно на 30%, а дальше просто «не мешать ей» удлиняться до $\sim 100\%$ (по молекулярной шкале длин). Однако существующие технологии не учитывают этого, мешая тем самым реализации содержащейся в макромолекуле структурно-кинетической информации и затрачивая ненужную энергию. Ниже мы приведем другие примеры «антитехнологий», но уже из изложенного следует, что хорошая технология должна не только считаться с «предназначением» данного полимера, но и «подгоняться» под информацию, касающуюся способности макромолекул к организации, а в пределе — самоорганизации. Ясно, что рекордом антитехнологии явилась бы попытка насильственной переработки в материал или изделие полимерной системы, способной к самоорганизации, в этот материал или изделие.

МАКРОМОЛЕКУЛЫ И КОНФИГУРАЦИОННАЯ ИНФОРМАЦИЯ

«Жаль при этом единственно того, что о множестве вещей узнаем слишком поздно и поэтому все время дискутируем страстно о делах давно завершенных»

(Ф р а н ц К а ф к а «Замок»)

В настоящее время многие мыслят статистическими категориями. Понятие *информация* также часто отождествляют с информацией, вычисляемой при вероятностном подходе. Но если более внимательно изучать окружающий мир, то окажется, что очень многие факты и явления, происходящие в нем, обусловлены индивидуальными взаимодействиями. Привыкнув также к квантовомеханическому подходу к описанию микрообъектов, мы «по умолчанию» принимаем, что все они без исключения взаимозаменяемы и неразличимы — от атомов до надмолекулярных образований. Сохранились черты такого подхода и в физике полимеров.

Как неоднократно отмечалось [2, 3], индивидуальную информацию, содержащуюся в каждой макромолекуле, не учитывают при разработке технологии изготовления и переработки, что приводит к превращению данной технологии в «антитехнологию». Успехи молекулярной биологии все-таки заставили обратить внимание на «индивидуальные» информационные характеристики макромолекул. Оказалось, что очень многие макроскопические свойства биологических систем зависят от строения и конфигурации одной или нескольких конкретных макромолекул. Более того, индивидуальные свойства конкретных макромолекул значительно более важны для всей биологической системы, чем среднестатистические свойства набора макромолекул. Так, генетический код — индивидуальная информация в макромолекуле, и общий для всех макромолекул ДНК фазовый переход — плавление. Отмечая полезность этого поворота во взглядах, авторы считают необходимым подчеркнуть, что биополимеры — всего лишь один из классов огромной семьи макромолекулярных систем. Исходя из этого, в дальнейшем не будем особо выделять свойства биополимеров, а изучать свойства, характерные для макромолекул вообще.

Рассматривая макромолекулу даже такого «простого» полимера, как полипропилен (ПП), отмечаем, что все его цепи индивидуализированы несмотря на то, что они могут быть, к примеру,

состоящими из одинакового числа звеньев [2]. Так, метильный радикал CH_3 может располагаться по обе стороны от плоскости, в которой расположена основная цепь. Поэтому, если цепь содержит n звеньев и нет особых ограничений для выбора направлений радикала CH_3 при присоединении мономера к концу растущей

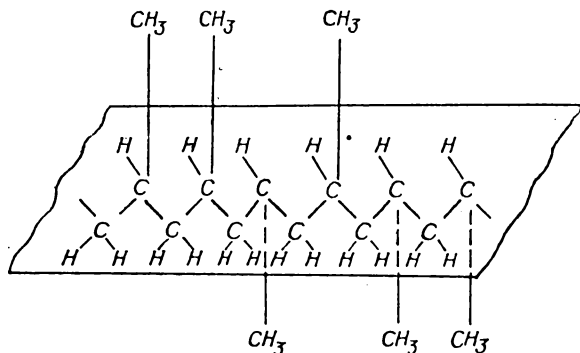
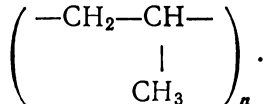


Рис. 1. Макромолекула полипропилена.

цепи, то могут получиться 2^n различных по характеру расположения этого радикала у цепей с одинаковой химической формулой:



Исходя из комбинаторного подхода к понятию информация, можно отметить, что описанная цепь, состоящая из n звеньев, содержит максимально n битов информации (рис. 1).

Как отмечено в работах [2, 3], у макромолекул есть фундаментальное свойство, сыгравшее решающую роль в эволюции биологических и добиологических систем. Если исследовать любое простое вещество определенного химического состава, то его молекулы не могут быть использованы в качестве системы знаков (символов), так как они неотличимы. То есть записать и сохранить какую-либо информацию на системе из простых молекул невозможно. Конечно, простые молекулы могут отличаться, например, степенью возбуждения, но эти отличия не сохраняются во времени. Совсем другое дело — макромолекулы полимеров. Даже если они имеют одинаковый состав и число звеньев, они все равно индивидуализированы: их можно отличить одну от другой, причем вследствие особой формы конденсации (все связи между звеньями ковалентны) эти отличия практически «вечны». Индивидуализированы даже отдельные достаточно протяженные участки макромолекул, так что и на них уже записана некоторая комбинаторная ин-

формация. Поэтому акт полимеризации — значительно более фундаментальное событие, чем обычный фазовый переход, ибо с момента возникновения макромолекулы система обретает способность к самоусложнению и самосовершенствованию. Согласно [2, 3], мы разделим информацию о макромолекуле на два совершенно различных понятия:

структурная информация, информация общая для значительной группы макромолекул, например химическая формула звена; конфигурационная информация (дискретная) — индивидуальная информация каждой макромолекулы, получаемая за счет комбинаций на определенных участках цепи некоторых конкретных первичных положений атомов и групп атомов звена (см. рис. 1).

Пример конфигурационной информации, «закодированной» в виниловой цепи, имеющей две возможные конфигурации соседей, — изо (И) и синдио (С) [4]:

ИИСИССИИССИССИССИСИИССИССИСС...

или

СССИИСССИИСССИИСССИИСССИСССИСС...

Здесь несущими информацию «кодонами» будут группы ИИС, ИСС, ИИИ и др. В принципе, по аналогии с азбукой Морзе, «буквой» можно считать любые сочетания небольшого числа последовательных звеньев; А. Н. Колмогоров [11] отмечал, что в большинстве случаев исследователя интересует количество информации в индивидуальном объекте A относительно индивидуального объекта B . Однако, как отмечено в работе [11], такая индивидуальная оценка количества информации может иметь разумное содержание лишь в случаях достаточно больших количеств информации. В соответствии с этим мало смысла в выяснении количества информации в последовательности 0110 относительно последовательности 1100. Но если мы возьмем таблицу случайных чисел и выпишем для каждой цифры цифру единиц ее квадрата по схеме

0123456789

0149656941,

то новая таблица чисел будет содержать примерно

$$\left(\log_2 10 - \frac{8}{10} \right) m$$

информации о первоначальной, где m — число цифр в таблицах.

В современной научной практике существует ряд подходов к определению информации. О статистическом (шенноновом) наиболее известном подходе мы уже упоминали, в качестве же следующего варианта упоминаем логико-семантические теории инфор-

мации, начало которым положено в работах Карнапа и Бар-Хиле-ла [12]. В данных теориях один из основных моментов — определение «высказывания», полностью описывающего одну из возможных альтернатив в данном языке. Наиболее важным является также понятие «описание состояния» и логической или индуктивной вероятности [13]. Согласно [12], описание состояния есть конъюнкция*, содержащая в качестве компонентов для каждого атомарного (т. е. неделимого на более мелкие части) предложения само это предложение или его отрицание (но не оба вместе) и не содержащая никаких других предложений. Описания состояния можно выразить в виде [13]

$$\begin{aligned} & (\pm)P_1(a_1) \wedge (\pm)P_2(a_1) \wedge \dots \wedge (\pm)P_n(a_1) \wedge; \\ & \wedge (\pm)P_1(a_2) \wedge (\pm)P_2(a_2) \wedge \dots \wedge (\pm)P_n(a_2) \wedge; \\ & \wedge (\pm)P_1(a_3) \wedge (\pm)P_2(a_3) \wedge \dots \wedge (\pm)P_n(a_3) \wedge; \\ & \wedge (\pm)P_1(a_n) \wedge (\pm)P_2(a_n) \wedge \dots \wedge (\pm)P_n(a_n), \end{aligned}$$

где \wedge — знак конъюнкции, т. е. пропозициональной связки «и», $P_1, P_2, P_3 \dots P_n$ — одноместные независимые предикаты**, $a_1, a_2 \dots a_n$ — индивиды, а символ (\pm) означает, что стоящее за ним высказывание может иметь или не иметь знак отрицания. Смысл описания состояния, согласно [13], заключается в том, что оно является высказыванием, полностью описывающим одну из возможных альтернатив в данном языке, а класс описаний состояния — все логически возможные состояния универсума относительно данных свойств индивидов. Возвращаясь к описанию макромолекул, видим, что на базе семантического подхода можно описать состояния макромолекулярных систем на любом заданном уровне: учитывая только химическую структуру; химическую структуру и конфигурацию; химическую структуру, конфигурацию и набор конформаций и т. д. Необходимо только помнить, что для каждого из этих вариантов будет построен свой язык описания с набором альтернативных состояний.

По нашему мнению, в молекулярной кибернетике наиболее перспективен алгоритмический подход к теории информации, развитый А. Н. Колмогоровым [11]. В этом случае информация объекта A относительно объекта B определяется сложностью (длиной) программы (алгоритма), описывающей последовательность действий, необходимых для преобразования объекта B в объект A . Очевидно, что описанные таким образом макромолекулы, например полипропилен с различными конфигурациями относительно молекул пропиленов либо атомов углерода и водорода, уже содер-

* Конъюнкция — в языке соответствует, как правило, соединительному союзу «и» (в двузначной логике), например, если высказывание A — «На Луне нет жизни», а высказывание B — «Земля обитаема», то их конъюнкция $A \wedge B$ — «На Луне нет жизни и Земля обитаема».

** Предикат — утверждение вида « x обитаема» называется предикатом, обозначаясь $P(x)$, где P — символ предиката «обитаема».

жат информацию, достаточную для воспроизведения конкретных конфигураций молекул. При этом разными информационными значениями будут описываться варианты изо-, синдио- и атактического полимера. Важно отметить, что информация о структуре макромолекул полипропилена может ощутимо помочь в технологии. Так, в случае синдио- или изотактического полимера последний способен кристаллизоваться и образовывать достаточно прочные волокна, а полимер атактический уже при невысоких температурах каучукоподобен и никаких волокон образовывать не может. Один из авторов [2] назвал «антитехнологией» попытки получить волокно из атактического полимера или каучук из изотактического, т. е. проектирование технологии без учета информационных свойств макромолекул. Исследования в области биополимеров, генетики во многом посвящены проблемам описания процессов репликации (воспроизведения) различных молекул или участков макромолекул. Таким образом, для описания этого рода процессов также наиболее подходит алгоритмическая теория информации. Вот как описывает процессы репликации М. Д. Франк-Каменецкий: «...ген — это часть ДНКового текста, которая содержит информацию об аминокислотной последовательности одного белка... Как же ген порождает белок? Это происходит в два этапа. На первом этапе, который получил название транскрипции, специальный фермент узнает (разрядка наша) последовательность нуклеотидов, расположенных между генами... и двигаясь вдоль гена снимает с него копию в виде молекулы РНК» [14]. Такого рода феноменологические описания процессов репликации, одних из наиболее важных в биологии, характерны для химико-биологической литературы. Авторы попытались рассмотреть этот вопрос более строго и оказалось, что описанный выше процесс репликации, а также его другие варианты подчиняются положениям, выведенным выдающимся кибернетиком Дж. фон Нейманом [15]. Проблема, поставленная им, формулируется следующим образом: может ли существовать автомат, который производит такие же автоматы без участия посторонних сил (здесь автор имеет, по-видимому, в виду только информационное, сигнальное участие посторонних сил, а не, например, энергетическое. Такой подход, по мнению авторов, типичен для кибернетики).

Здесь авторы по умолчанию перешли к определенному отождествлению макромолекулы с автоматом. Поэтому представляется необходимым кратко обосновать подобный тезис, а также привести некоторые сведения о теории автоматов — одном из важнейших разделов кибернетики.

Конечным автоматом [16] называют систему:

$$S = \{A, Q, V, \delta, \lambda\},$$

в которой $A = \{a_1 \dots a_m\}$, $Q = \{q_1 \dots q_n\}$, $V = \{v_1, v_2 \dots v_k\}$ — конечные множества (алфавиты), а $\delta: Q \otimes A \rightarrow Q$, $\lambda: Q \otimes A \rightarrow V$; причем A — называют входным алфавитом; V — выходным; Q — алфавитом состояний; δ — функцией переходов; λ — функцией выходов. Ко-

нечный автомат [17] представляет собой объект, функционирующий в моменты автоматного времени $t_0 < t_1 < t_2 < t_3 \dots$; в каждый момент t_i из этой совокупности он находится в одном из возможных состояний $q(t_i) \in Q$. В каждый момент $t_j \in T$, где \in — знак принадлежности, начиная с t_1 , на вход автомата поступает входной сигнал, одна из букв алфавита A . Автомат реагирует на поступление входных сигналов. Так, во-первых, состояние автомата изменяется в соответствии с одношаговой функцией переходов

$$q(t) = \varphi[q(t-1), a(t)];$$

Таблица 1

x	z			
	z ₁	z ₂	z ₃	z ₄
x ₁	z ₂	z ₃	z ₁	z ₂
x ₂	z ₁	z ₁	z ₄	z ₄
x ₃	z ₂	z ₃	z ₂	z ₁

Таблица 2

x	z			
	z ₁	z ₂	z ₃	z ₄
x ₁	y ₁	y ₂	y ₁	y ₂
x ₂	y ₂	y ₁	y ₂	y ₁
x ₃	y ₁	y ₁	y ₂	y ₂

во-вторых, в каждый момент автоматного времени на выходе автомата появляется выходной сигнал $v(t)$ — буква выходного алфавита V , определяемый функцией выходов

$$v(t) = \psi[q(t-1), a(t)].$$

Конечный автомат может быть задан при помощи таблиц переходов и выходов. Табл. 1 и 2 описывают автомат с входным алфавитом $X = \{x_1, x_2, x_3\}$, множеством состояний $Z = \{z_1, z_2, z_3, z_4\}$ и выходным алфавитом.

Если в автомат, находящийся в состоянии z_1 , поступает входной сигнал x_1 , автомат переходит в состояние z_2 ; выходной сигнал при этом будет y_1 и т. д. Описанный автомат называют автоматом Мили. В теории автоматов доказывается, что все автоматы любой сложности можно свести к комбинации автоматов Мили. Автомат может быть синхронным в том смысле, что моменты τ_1, τ_2, τ_3 (поступления входных сигналов, изменения состояний и выдачи выходных сигналов) заранее определены. Асинхронные автоматы не имеют «жесткой» тактности; они изменяют свои состояния при поступлении входных сигналов, которые могут подаваться на вход в любые моменты времени. В последнем случае иногда можно рассматривать автомат как объект, функционирующий в непрерывном времени.

Свойства конечных автоматов и макромолекулярных систем представимы в виде, приведенном в табл. 3.

Имеются и другие свойства макромолекул, описываемые аналогично свойствам конечных автоматов.

Так, Дж. фон Нейман сформулировал задачу: «Может ли существовать автомат, воспроизводящий себя?». Чтобы ответить на этот вопрос на системном уровне, т. е. с применением теоретико-аксиоматического подхода, ему пришлось использовать значительное количество последних достижений современной диск-

Т а б л и ц а 3

Свойства конечных автоматов	Свойства макромолекулярных систем
<p>Стабильный набор состояний, в которые они переходят с учетом предыдущего состояния и набора входных сигналов.</p> <p>Если нет никаких новых входных сигналов, то эти состояния могут храниться бесконечно долго. Каждому состоянию соответствует конкретный выходной сигнал.</p>	<p>Стабильный набор конфигурационных состояний, в которые они переходят на основании предыдущих (заготовок) и параметров окружающей среды в процессе формирования.</p> <p>Конфигурации макромолекул сохраняются длительное время при отсутствии изменения условий и параметров внешней среды. Каждому состоянию соответствуют конкретные физико-химические и информационные характеристики макромолекул.</p>

ретной математики. В результате анализа было показано, что в принципе самовоспроизведение автоматов возможно.

Интересен тот факт, что работы фон Неймана по самовоспроизведению автоматов сделаны в конце 40-х годов нашего столетия, а почти в это же время была расшифрована структура ДНК — знаменитая двойная спираль. Но, к нашему удивлению, эти работы не пересеклись, хотя имелись все предпосылки, хотя сам фон Нейман был по специальности химиком. Однако, как это ни странно, до сих пор результаты анализа воспроизведения автоматов не связаны с наукой о макромолекулах. Авторы в меру своих скромных возможностей попытаются восполнить этот пробел.

Так, фон Нейманом показано, что для воспроизведения автомата первым этапом является снятие копии описания (разрядка наша) этого автомата, а только затем по этому описанию можно воспроизвести автомат. Фон Нейман доказал это положение, используя как основу известные результаты дискретной математики. Так, допуская, что воспроизведение автомата происходит без этапа предварительного копирования, мы столкнемся с парадоксом типа парадокса Ричарда [18], а истоки его и ему подобных в свою очередь восходят к одной из важнейших теорем современной математики — теореме Курта Геделя «о неполноте». Фон Нейман рассматривает два метода, позволяющих автомату воспроизводить себя. В «пассивном» методе самовоспроизводящийся автомат содержит внутри себя свое пассивное описание и считывает его так, что оно не может помешать работе автомата. В

«активном» методе самовоспроизводящийся автомат исследует самого себя, строя свое описание в окружающем его пространстве. Фон Нейман отдал предпочтение первому методу. Нам представляется, что в случае воспроизведения информационной структуры ДНК, имеющей важнейшее значение для самого процесса возникновения и продолжения жизни, более вероятен как раз второй вариант. Эта гипотеза находит экспериментальное подтверждение. Само построение спирали ДНК не случайно. В системе из двух сопряженных спиралей одна из них является «описанием» второй. Вполне вероятно, что происходят и изменения в процессе существования макромолекулы, в результате которых спирали меняются ролями. Представляется также, что механизм воспроизведения ДНК через копии РНК также содержит в своей основе кибернетические принципы, строго обоснованные фон Нейманом. Описывая процесс репликации, отметим, что после того как РНК-полимераза снимет с участка длинной молекулы ДНК, с гена, копию РНК, эта копия гена используется на втором этапе синтеза белка в трансляции. В качестве транслятора используется рибосома, сложнейший агрегат, построенный из полусотни различных белков и молекулы РНК [14]. Рибосому называют [14] «молекулярной вычислительной машиной, переводящей тексты с нуклеотидного языка ДНК и РНК на аминокислотный язык белков».

Поясним, почему самовоспроизведение является столь важным моментом в процессе эволюции биологической и добиологической. Как пишет Нейман [15], тот факт, что живые организмы создают себе подобных, вполне нормален. Без этого организмы не могли бы существовать. Да и на более низкой ступени иерархии структур также существует самовоспроизведение. Это, к примеру, репликация ДНК. И вообще, по-видимому, на многих уровнях иерархии самоорганизующихся структур (макромолекулы—клетки—организмы—популяции) существует воспроизведение. Но если вставить в приведенную выше цепь несколько промежуточных элементов, то она будет выглядеть так: макромолекулы—органеллы клеток—клетки—органы—организмы—популяции. Введенные элементы—органы и органеллы клеток явно выпадают из функционального единообразия, поскольку они не воспроизводят себя. Действительно, печень, например, не воспроизводит еще одну печень. Самовоспроизводство клеток печени происходит, напротив, непрерывно. В течение жизни человека все клетки этого и многих других органов полностью обновляются неоднократно.

Фон Нейман [15] считает процесс самовоспроизведения очень важным, поскольку появление самоорганизовавшегося организма (структуры) чрезвычайно маловероятно, но как только эта структура получила возможность самовоспроизводства, вероятностные законы перестают работать и этих структур может возникнуть множество. Вероятностные соображения «оставляют здесь щель, через которую удастся проникнуть с помощью процесса самовоспроизведения». Вместе с тем есть и еще один не менее важный аспект, возникающий при решении проблемы воспроизводства. В случае

наличия большого числа одинаковых структур происходит явление, названное К. М. Завадским «синтезогенезом». Структуры объединяются для решения важных задач, которые без такого объединения решить нельзя. Например, пчелы, которые при повышении температуры улья, интенсивно работая крылышками, добиваются снижения этой температуры. Авторы работы [20] называют синтезогенез «своеобразной полимеризацией». Это важный момент, однако совпадение здесь с наукой о полимерах не только внешнее. Внешне мы показали, насколько близко описание макромолекул к описанию автомата. Показано [20], что если два автомата объединялись чисто механически, то число их состояний растет как n^2 , если каждый из этих автоматов имел n состояний. Если же эти автоматы объединяются за счет случайного парного взаимодействия, то они теперь могут функционировать как автомат с большей глубиной памяти. Все это в такой же мере относится к полимерам. Объединенные в полимерные, мономерные звенья имеют большее число конфигурационных состояний. Кроме того, количество информации, которую теперь содержит макромолекула, также растет. Мы оцениваем предельные размеры полимерных молекул. Здесь представляется необходимым отметить, что именно полимерные молекулы начинают работать как «самовоспроизводящийся автомат» (ДНК, РНК). Однако, по-видимому, на этом кончаются возможности, предоставляемые синтезогенезом. Дальнейшее развитие системы становится возможным только на основе так называемого «сегрегациогенеза» [20], в процессе которого идет не только усложнение структур путем объединения более простых элементов в их наборы, но и процесс дифференциации функций.

Так, органеллы клетки уже выполняют специфические функции строго дифференцированно. Вне клетки органелла уже не может функционировать. Точно так же и в улье появляются специализированные пчелы, которые сами по себе не могут существовать. А сообщество, популяция пчел уже не может существовать без всех видов специализированных насекомых.

Все это, видимо, проявление общего закона развития, эволюции систем, который предполагает последовательное чередование этапов:

самовоспроизведение—объединение (синтезогенез);

дифференциация (сегрегациогенез) — образование структуры, способной к самовоспроизведению — самовоспроизведение—объединение... и т. п.

Совершенно очевидно, что должны существовать некоторые информационные критерии предельных состояний этапов эволюции. Основой их вычисления, по-видимому, должен стать критерий эффективности выполнения системой каждого уровня своей целевой функции.

Так, на каждом из переходных этапов:

— объединение—дифференциация с образованием новой структуры;

набор необъединенных структур—объединенная структура.

Надо думать, существует конкуренция между имеющимися и возникающими структурами. Если возникающие структуры более «жизнеспособны», более эффективно выполняют свою целевую функцию, то они выживают, а менее жизнеспособные погибают. Конечно, это весьма упрощенные представления. На самом деле каждый из этапов эволюции систем происходит на фоне их значительного разнообразия. Идет борьба не только между новой и предыдущей структурой, но и с другими видами.

Согласно [21], в молекулярной эволюции качественный скачок также был обусловлен интеграцией нескольких самовоспроизводящих макромолекулярных элементов в кооперативную систему, однако не какую-нибудь, а специфическую, обладающую рядом свойств:

связь между элементами должна допускать конкуренцию каждого из них с их ошибочными копиями, иначе элементы не могут сохранить содержащуюся в них информацию;

связь между элементами должна исключать конкуренцию между теми самовоспроизводящимися единицами, которые интегрируются в новую, объединенную структуру, а напротив, обеспечивать их кооперацию;

новая объединенная система должна успешно конкурировать с любой другой, а также отдельным элементом, из которого она создана.

Авторы работы [21] утверждают, что все эти три условия можно выполнить только при установлении циклической связи между самовоспроизводящимися элементами. Функциональная связь между автономными самовоспроизводящимися единицами сама должна иметь самоусиливающуюся циклическую природу, поскольку в противном случае суммарное информационное содержание не сможет сохраниться.

Так проходит, согласно [21], эволюция полинуклеотидов в структуру РНК. Это типичный «синтезогенез».

На более высоком этапе иерархии структур выполняются также все элементы закона эволюции систем.

Так, А. Н. Студитский [22] утверждает, что существует всего два ответа на вопрос о том, как в процессе эволюции формируется клетка живого организма.

Первый — мембранный, в котором все мембранные устройства клетки, включая ядро, возникли в протоклетке из вытягиваний и разрастаний мембранной плазмолеммы (схема Робертсона).

Второй — процесс более предпочтительный, чем комплексирование бактериоидных предков [22]. При этом у первичных бактерий, объединившихся в некий комплекс, происходит специализация и они превращаются в органеллы клетки.

Естественно, процессы специализации элементов происходят на том этапе эволюции, когда клетка существует исключительно в одиночку. Объединение клеток в клеточные комплексы с дальнейшей их специализацией — следующий этап эволюции биологических систем.

Как отмечает П. Флори [19], конформационное состояние связи в макромолекуле не является постоянным. Конфигурация цепи, подвергающаяся быстрым изменениям, вызываемым тепловым движением, является переходящей. В то же время структурная конфигурация макромолекул, включая варианты с различными положениями радикала (изо, синдио, цис, транс и т. п.), очень стабильна, и один раз возникшая структура необратима. Достаточно очевидно, что описать структурную (дискретную) информацию макромолекулы можно в определенном приближении с использованием принципов описания марковских процессов (т. е. процессов со связанными вероятностями). Так, если звено имеет одну из конфигураций с определенной вероятностью, то находящееся рядом звено занимает определенную конфигурацию уже с вероятностью, учитывающей вероятность конфигурации предыдущего звена. Проведено большое количество расчетов конфигураций и конформаций макромолекул в зависимости от энергетических потенциалов взаимодействия их частей, звеньев и т. п. На их основе составляются таблицы, графики вероятностей состояний, исходя из известного принципа: меньше энергия состояния — больше его вероятность. Все эти описания базируются большей частью на статистике Максвелла—Больцмана. Для информационного описания конфигураций все сведения о вероятностях ряда состояний макромолекул также имеют значения хотя бы из тех соображений, что мы просто будем знать, какие конфигурации в принципе возможны, а какие запрещены. Вместе с тем, если исходить из алгоритмического подхода к информации, то необходимо воспроизвести алгоритм процесса получения конкретной макромолекулы (ее конфигурации). Разница между описаниями алгоритмов и будет различием в информации, содержащейся в макромолекулах. На первый взгляд, первое (энергетическое) и второе (алгоритмическое) описания не будут иметь ничего общего между собой. Можно предположить, что на самом деле между такими описаниями будет значительная корреляция. Попытки найти корреляции в стиле Л. Бриллюэна, который искал их между энтропией системы и шенноновой ее информацией, не представляются нам эффективными (см. главу 6). Напротив, корреляция между алгоритмической информацией и термодинамическими характеристиками макромолекул должны явиться серьезной задачей для перспективных исследований.

Возвращаясь к описанию информационного содержания в макромолекулах, напомним замечание известных японских ученых Тюдзе и Каваи [23]. Они отмечают, что если сравнивать между собой информационные свойства так называемых биополимеров, встречающихся в природе, и синтетических полимеров, то структура последних в значительной мере детерминирована вероятностными процессами. Исходя из алгоритмического представления информации, можно сказать, что образование синтетических полимеров обусловлено все-таки алгоритмом технологии в соответствии с основным определением этого понятия: «Алгоритм — это процесс последовательного построения величин, идущий в дискретном

времени таким образом, что в начальный момент времени задается исходная конечная система величин, а в каждый следующий момент система величин получается по определенному закону (программе) из системы величин в предыдущий момент времени» [24]. А биополимеры обязаны своим возникновением не алгоритмическому, а эвристическому процессу — «процессу последовательного построения величин, идущего в дискретном времени таким образом, что в начальный момент времени задается некоторая система величин, а в каждый следующий момент система получается не по одному, а по ряду определенных законов из имевшихся в предыдущий момент времени. Эти законы могут меняться в ходе эвристического процесса». В случае биополимеров такая эвристика — эволюционный процесс. В этом и представляется разница между полимерами синтетическими и био; первые изготавливаются по строгому технологическому алгоритму, полученному в результате некоторой исторической случайности и совсем не оптимальному. Авторы получены в результате многовековой эволюционной самоорганизации. Авторам хотелось бы отметить, что, исходя из принципов молекулярной кибернетики, как раз и не представляется возможным считать современные технологии получения полимеров или изделий из них оптимальными. Никто не возразит против того, что значительным достижением будет проведение такого же направленного эволюционного отбора технологий для синтетических полимеров. Но ведь для эволюции биополимеров потребовались сотни миллионов лет, а нам ждать некогда. Здесь на помощь молекулярной кибернетике придет кибернетика обычная. В последнее время очень активно развивается отрасль последней — эволюционное моделирование сложных систем на ЭВМ. Развита многие эволюционные алгоритмы и программы, обеспечивающие оптимальную самоорганизацию сложных систем.

Уместно привести некоторые основы техники эволюционного программирования [25], исходя из которого, по нашему мнению, можно перестроить технологию химических производств.

Согласно [25], эволюционная программа реализует ускоренное моделирование заданных процессов естественной эволюции, причем в каждый момент времени сохраняется тот «организм», который наилучшим образом может справиться с данной задачей. «Организм» задается в виде математической формулы, описывающей определенную логику преобразования последовательности входных сигналов в последовательность выходных. «Родительский» организм оценивается в зависимости от способности принимать требуемое решение на основе имеющихся данных. Он подвергается мутации и производит на свет «потомка», которому ставится такая же задача и который оценивается таким же образом. Организм, демонстрирующий наилучшую способность выполнять требуемые функции, сохраняется и служит «родителем» для нового поколения. Таким образом, прогрессирующая эволюция производит все лучшие и лучшие программы для решения имеющейся задачи. В некоторый момент реального времени или в тот, в кото-

рый получена достаточно хорошая программа, принимается фактическое решение. Всякий раз, когда поступает новая информация, происходит эволюционный поиск логической структуры, подходящей для принятия требуемого решения.

Наиболее перспективное использование «эволюционной технологии», как называли этот подход авторы, — постоянно действующая эволюционная оптимизация, или, если хотите, «самооптимизация» химического процесса. Предпосылки такого подхода будут изложены в главе 9.

САМОПРОЧТЕНИЕ КОНФИГУРАЦИОННОЙ ИНФОРМАЦИИ В СИСТЕМАХ БИОПОЛИМЕРОВ

«...Конструирующий автомат плавает по некоторой поверхности, окруженный неограниченным числом запасных частей. В памяти автомата хранится описание того автомата, который должен быть создан. Руководствуясь этим описанием, он отбирает необходимые части и организует из них требуемый автомат. Чтобы это сделать, он должен обладать устройством, позволяющим захватывать и идентифицировать части, пришедшие с ним в контакт»

(Дж. фон Нейман «Теория самовоспроизводящихся автоматов»)

В практике человечества несомненно существуют два альтернативных, на первый взгляд, пути развития технологий. Первый, представляющийся наиболее логичным, — от развития науки, детальных представлений о существе дела к разработке технологии. Таким путем развивается, например, ядерная энергетика. И второй путь — от случайного открытия одного, в подавляющем большинстве случаев совсем не оптимального варианта технологии и упорных попыток его использовать, вплоть до разработки новых, опять-таки единичных вариантов данной технологии, без достаточного понимания основных законов, определяющих суть этой технологии. Так мы использовали электрические машины, не зная сущности законов электродинамики (мы и сейчас их не совсем знаем!). Используем, например, повсеместно частоту промышленного тока 50 или 60 Гц. А почему не 85 Гц? Таких примеров из любой отрасли человеческой деятельности можно привести сотни. Но поскольку монография посвящена полимерам, то покажем, каким образом этот второй путь возник в технологии полимерных волокон и, к сожалению, существует до сих пор.

Известно, что практически вся мощнейшая современная технология химических волокон с ее развитым арсеналом технических средств и практически неограниченными возможностями расширения ассортимента волокон специального и бытового назначения продолжает основываться на реологическом процессе, который был взят Шардонне на вооружение лишь из-за счастливого недоразумения [26]. Считалось, что технологическая схема копирует паука или шелкопряда. Этот вопрос имеет довольно длинную историю. Еще Роберт Гук указывал, что получение нити, подобной паутине или натуральному шелку, возможно в лабораторных условиях: надо лишь найти «клеякую жидкость», которую используют для этой цели паук или шелкопряд. В конце XVIII в. Бюффон, наблюдая за шелкопрядами и пауками, пришел к выводу, который до сих пор представляется очевидным: они выдавливают пресловутую «клей-

кую жидкость» через выходные отверстия желез — фильеры. Реомюр также указывал на возможность воспроизведения процесса получения нити искусственным путем. Однако подходящая «клеякая жидкость» не была найдена. Это и не удивительно. Поиски клейкой жидкости не могли быть успешными до тех пор, пока химики, опять таки эмпирическим путем, не научились готовить растворы полимеров.

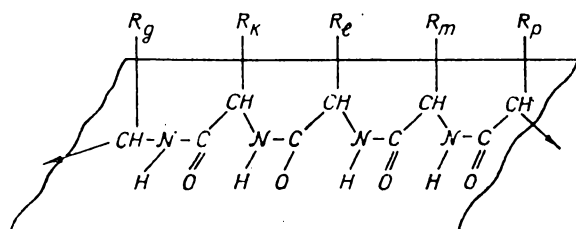
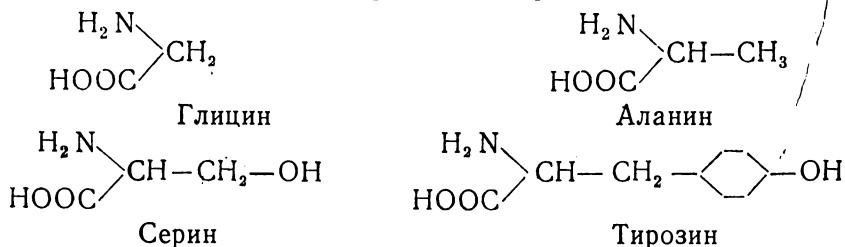


Рис. 2. Макромолекула фиброина.

Однако ни паук, ни шелкопряд, как мы знаем теперь, не выдавливают секрет желез, содержащих водный раствор волокнообразующего белка фиброина в смеси со вторым белком — серицином, играющим роль смазки, клея и «реологического катализатора». Все обстоит совсем по-другому. В природе в ходе длительной эволюции выработались значительно более тонкие, совершенные и экономные механизмы «формирования волокон», нежели весьма энергоемкая операция выдавливания (экструзии) [26]. Природный механизм образования шелка и паутины связан с присущей всем полимерам способностью к продольному течению [27]. Здесь мы переходим к собственно предмету данной главы, а именно к процессу динамического самопротечения информации в макромолекулах. Поскольку фиброин (один из немногих белков, выполняющих свою биологическую функцию вне организма) является с этой точки зрения обычным полимером, то именно на его примере видно, как происходит процесс самопротечения информации, обуславливающий воспроизводимый морфогенез полимерных волокон.

Единичная цепочка фиброина шелкопряда *Bombyx mori* состоит примерно из 300 звеньев. Из 20 возможных радикалов (рис. 2) фиброин содержит 18, причем сгруппированы они вдоль цепи строго определенным образом. Четыре аминокислоты



образуют две способные кристаллизоваться последовательности, каждая из которых содержит немногим более 100 звеньев. Эти последовательности можно описать в виде автоматов с несколькими состояниями. Такого рода последовательности именуются [28] «кристаллизующимися пептидами». Сочленены они некристаллизующимся пептидом, состоящим из всех других видов аминокислотных остатков. Обилие разных боковых радикалов R_i (рис. 2) делает невозможным включение их в общую кристаллическую ре-

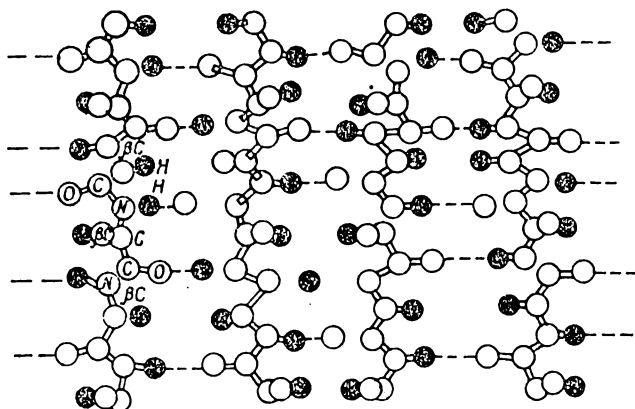


Рис. 3. Двумерная решетка (β -форма полипептидных цепей).

шетку; и соответствующее сочленение оказывается гибким (если решетка образуется, она имеет необычный характер слоистой суперпозиции двумерных решеток — сложная структура) [29], так как радикалы R_i , как правило, не умещаются в ячейках одной и той же трехмерной решетки. Такие же гибкие «довески» находятся на краях макромолекулы.

На рис. 3 показана схема двумерной решетки или слоя (β — форма полипептидных цепей). Двумерный кристаллический порядок образован только за счет хребтов полипептидных цепей, соединенных межпептидными водородными связями. Различные же радикалы R_i , присоединенные к α -атомам углерода (на рисунке R_i не показаны), либо препятствуют превращению этого порядка в трехмерный, либо вообще полностью его дезорганизуют (аморфизуют). Кристаллизующийся пептид обладает к тому же еще одним важным свойством: будучи изолирован, он способен принять конформацию так называемой α -спирали Полинга—Кори (рис. 4). Каждый виток такой спирали содержит примерно 3,6 мономерных звена и связан тремя водородными связями с соседним витком, поэтому соответствующий участок цепи обладает значительным запасом жесткости. На рис. 5 показана схема образования волокон в результате α — β перехода в растворе фиброина. С началом продольного течения беспорядочно расположенные мо-

лекулы (рис. 5, а) под действием продольного градиента скорости распрямляются и ориентируются вдоль линий течения (рис. 5, б). Поскольку α -спирали неустойчивы, следующая стадия — возникновение также неустойчивой неупорядоченной конформации (рис. 5, в). Скольжение цепей друг относительно друга регулируется распределением зарядов в некристаллизующихся пептидах. После прекращения скольжения кристаллизующиеся пептиды переходят в антипараллельную β -форму (рис. 5, г). Упорядоченные жесткие участки сочленены гибкими «аморфными» цепями. Характерно, что скольжение цепей друг относительно друга регулируется обратной связью, обусловленной способом распределения зарядов в некристаллизующихся пептидах. Таким образом, возникает структура, в которой упорядоченные жесткие участки сочленены гибкими «аморфными» цепями.

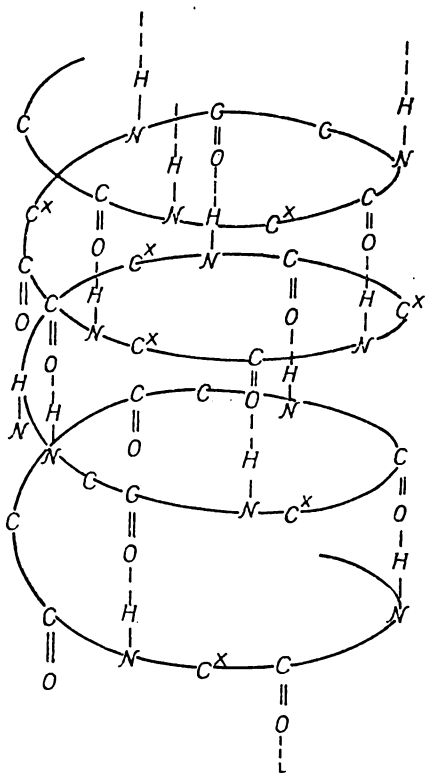


Рис. 4. Кристаллизующийся пептид в форме α -спирали Полинга—Кори.

печивают растворимость белков в воде. Однако другая часть радикалов R_i может быть неполярной — гидрофобной; и если относительная концентрация этих радикалов велика, то макромолекула вообще будет нерастворима в воде. В самом общем случае в водной среде амфифильная (содержащая радикалы R_i различной природы и полярности) молекула стремится приобрести конформацию с минимумом свободной энергии, т. е. свернуться в квазисплошную («глобулярную») структуру, в которой большинство полярных групп оказалось бы снаружи, а гидрофобных — внутри. Однако простое сворачивание оказывается невозможным, ибо отдельные участки цепи, положение и длина которых предопределе-

ны последовательностью радикалов R_i , способны приобретать жесткие конформации α -спирали Полинга—Кори (рис. 4) или «кросс- β -формы» (рис. 6). По-видимому, возможны и другие формы локальной упорядоченности полипептидной цепи [29, 30]. Линдерштрем-Ланг, впервые обративший внимание на невозможность произвольного закручивания полипептидной цепочки, предложил рассматривать три уровня организации белковой молекулы отдельно [31]. Последовательность звеньев в вытянутой цепочке

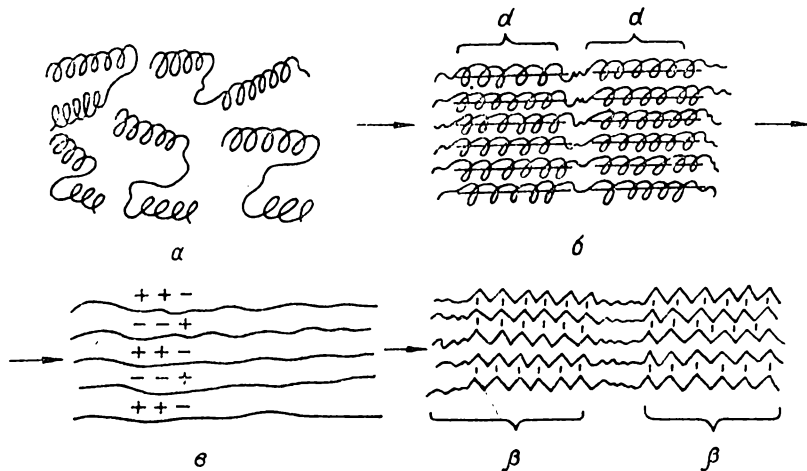


Рис. 5. Схема образования волокон в результате α — β перехода в растворе фибрина.

(проконтролированная генетически) — первичная структура белка; последовательность и характер упорядоченных жестких и неупорядоченных гибких участков цепи — вторичная. Несмотря на то что наличие жестких участков ограничивает возможности сворачивания цепи в сплошную «глобулу», образуется некоторая компактная структура со сложным поверхностным рельефом, называемая третичной. В отдельных случаях, обычно при избытке гидрофобных радикалов R_i , простые «глобулы» (на самом деле это, исходя из исследований Перутца—Кендрию [29] совсем и не глобулы, а гораздо более сложные образования) объединяются в еще более сложные — четвертичные (термин Бернала) структуры. Отметим, что все структуры (вторичная, третичная и четвертичная, если таковая имеется) однозначно предопределены первичной

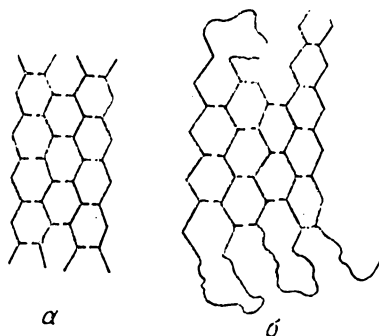


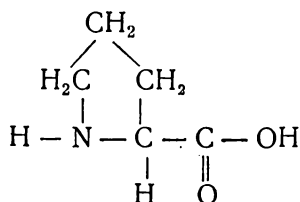
Рис. 6. Кристаллизующийся пептид в «кросс- β -форме».

(представляющей собой конфигурационную информацию). Реализуется эта информация путем некоторого «динамического самопрочтения»: будучи помещена в определенные условия, цепочка примет ту единственно возможную конфигурацию, которая «запланирована» в записи на ее первичной структуре. Это чрезвычайно важно: передача генетической информации в истинном значении этих слов заканчивается на уровне первичной структуры, а дальнейший морфогенез структур все более возрастающей сложности предопределен информацией, заложенной в первичной структуре.

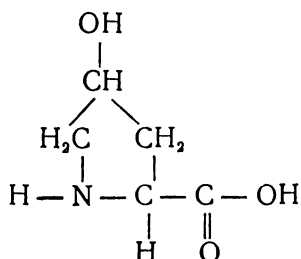
Однако не следует полагать, что и в белках первичная структура «оптимальна» (это условие вообще трудно определить), так как отбор носил тоже до известной меры статистический характер. Когда возникал хороший (а не наилучший) вариант первичной структуры, обеспечивавший достаточную биологическую активность на уровне третичной (или четвертичной) структуры, он и фиксировался в дальнейшем процессе отбора. Поэтому О. Б. Птицын называет белки на уровне первичной структуры «отредактированными статистическими сополимерами». В роли «редактора» выступает, разумеется, естественный отбор. Такое определение первичной структуры никак не противоречит принципу «предназначения» биополимеров.

Проследить за выполнением этих условий удобнее всего на примере широко распространенных в природе биологических фибриллярных структур. Их особенности — строгая периодичность (это подтверждается исследованиями с применением методов малоуглового рассеивания рентгеновских лучей и тепловых нейтронов). Существуют, по-видимому, два общих принципа морфогенеза фибриллярных структур, или фибриллогенеза в живых системах, воспроизводимых также и *in vitro*. Один связан с прямым генерированием ориентационного порядка из мономеров или бесструктурного раствора, другой представляет собой типичную сборку.

Наиболее характерный пример сборки — многостадийное образование спирально-фибриллярной структуры коллагена [32]. Коллаген (он входит в состав кожи, соединительной ткани и т. п.) по составу еще проще фиброина: состоит в основном лишь из 12 типов аминокислотных остатков, причем преобладают глицин, а также две аминокислоты:



Пролин



Оксипролин

Известно, что триспиральная молекула тропоколлагена с молекулярной массой ~ 350000 в мягких условиях может быть дегенирирована до «первичной желатины», представляющей собой в воде при кислых и температуре выше 30°C молекулярную дисперсию статистических клубков, несколько различающихся по контурной длине. Однако при понижении температуры цепочки постепенно восстанавливают спиральную конформацию полипролина II. По-видимому, восстановление вторичной структуры отдельных цепей еще не приводит к восстановлению их жесткости по всей длине; однако частично заспирализованные цепочки могут уже объединяться в тройную спираль исходного типа («полиглицин II»). Вероятно, в ходе этой агрегации происходит полное распрямление индивидуальных клубков. Агрегация происходит по принципу «отыщи партнера» строго определенным образом; «план» процесса образования третьей спирали обусловлен генетически и записан в первичной структуре каждой из составляющих цепей.

Аналогичным образом, но с более явным выражением принципа «отыскания партнера», происходит и реконструкция биспиральных молекул ДНК, которые можно рассматривать как некие протофибриллы.

После восстановления протофибрилл, или макромолекул тропоколлагена, все так же спонтанно происходит дальнейшее образование фибриллярной структуры. Свободные тяжи более длинных моноцепочек, объединяясь в короткие двойные спирали, образуют гибкие сочленения между тропоколлагеновыми единицами; одновременно начинается спиральная агрегация образовавшихся таким путем микрофибрилл в «кабели» с винтовыми осями различных порядков — вплоть до возникновения макрофибрилл, видимых в оптический микроскоп. Эти процессы спонтанной агрегации (самоорганизации) можно воспроизвести *in vitro*, начиная с любой стадии. Например, дезагрегацию нативной системы можно остановить на тропоколлагеновых молекулах и наблюдать затем восстановление микрофибрилл (видимых в электронный микроскоп). Можно довести дезагрегацию до микрофибрилл, тогда будет наблюдаться восстановление «кабелей» и т. п.

Строгая периодичность структуры коллагена как в продольном, так и в поперечном направлениях (именно с поперечной периодичностью связана фибриллизация системы) predetermined, как описано выше, первичной структурой, или конфигурационной информацией, т. е. строгим характером чередования аминокислотных остатков в цепи [33, 34]. Передача этой информации на высшие уровни структурной организации связана с образованием первичных структурных единиц; таковыми являются моноспирали в конформации полипролина II (точнее, два типа таких спиралей, различающихся по длине и составу). С таких спиралей начинается «сборка» фибриллярных структур через протофибриллу, микрофибриллы, «кабели» и т. д.

Подчеркнем, что первичный элемент, с которого начинается сборка, вовсе не представляет собой нечто застывшее и неизмен-

ное. Наоборот, именно молекулярный полиморфизм [35] биополимеров делает возможным в строго определенных условиях многостадийную сборку фибрилл по принципу спиральной агрегации. Полная денатурация связана с утратой первичным элементом необходимой конформации (при переходе полипролин II—клубок), а восстановление нативной структуры начинается с восстановления конформации первичного структурного элемента. Поскольку в биологических системах первичный структурный элемент — макро-

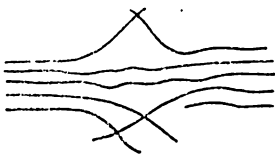


Рис. 7. Модель Хирла расположения участков в микрофибриллу.

молекула с высоким уровнем конфигурационной информации, процесс сборки однозначно приводит к образованию высокоорганизованных структур. Видимо, биологический фибриллогенез (*in vivo*) в коллагеновых структурах протекает аналогичным образом, а предложенная схема во многом типична для всех биологических фибриллярных систем, структурирующихся по принципу сборки. По-видимому, сходным обра-

зом происходит сборка фибрилл и высших уровней надмолекулярных образований (НМО) в тканях, образованных другим фибриллярным белком — кератином. На первый взгляд, рост волос, шерсти более напоминает ориентированную полимеризацию, т. е. чистое генерирование ориентационного надмолекулярного порядка из мономера. Однако на самом деле рост волоса как (по «технологической» терминологии) элементарного волокна не связан непосредственно с гораздо более быстрым процессом матричного синтеза белковых молекул, и их последующая агрегация и собственно рост обусловлены медленным, но непрерывно происходящим процессом такой сборки на существенно надмолекулярном уровне.

Вдоль микрофибриллы строго определенным образом чередуются кристаллические (в α - или β -форме в зависимости от видовой и тканевой принадлежности кератиновой структуры) участки, сочлененные гибкими аморфными. Эта структура напоминает модель Хирла (рис. 7). Само существование кристаллических участков предопределено локальной первичной структурой индивидуальных цепей, т. е. чередованием аминокислотных остатков, способных к спирализации и (или) кристаллизации.

Каковы же особенности внутренней структуры кристаллитов в белковых фибриллах [34]? α , L-(гомо)Полипептидная цепочка, будучи в сущности полиамидом типа нейлон 2, способна к обычной трехмерной кристаллизации с образованием почти всех привычных морфологических форм. Однако наличие большого количества разнообразных боковых радикалов (12 у коллагена, 18 у фиброина и 20 у кератина) полностью исключает трехмерную кристаллизацию. Наиболее типичная кристаллическая структура работающих на прочность участков фиброина и кератина — слоистоскладчатая форма. Ее легко визуализовать, представив себе плоскую кристаллическую решетку, образованную антипараллельно упакованными полипептидными цепями [33]. По обе стороны плос-

костей таких решеток расположены боковые радикалы, которые уже не могут встроиться в трехмерную решетку. Поэтому кристаллиты представляют собой суперпозицию таких слоев, причем между смежными слоями действуют достаточно большие силы когезии, обусловленные в первую очередь водородными и солевыми связями. В кератине дополнительно смежные цепи сшиты дисульфидными мостиками цистина.

Однако для того, чтобы могли возникнуть кристаллиты даже такого типа, чередование аминокислот на кристаллизующемся участке цепи должно исключать всякие помехи к образованию хотя бы двумерной решетки. В конечном итоге дискретное и генетически контролируемое распределение боковых радикалов (первичная конфигурационная информация) по кристаллизующимся и некристаллизующимся блокам одной и той же цепи и обеспечивает абсолютно строгую периодичность. Сходным образом обеспечивается периодичность и в блоках α -кератина, где кристаллические участки представляют собой агрегаты α -спиралей с общей винтовой осью высшего порядка. В коллагене абсолютная периодичность обусловлена более простыми причинами, хотя они также контролируются генетически: чередование жестких тройных спиралей и биспиральных гибких сочленений между ними.

В обычных синтетических полимерах спонтанную сборку фибрилл с развитием высокого уровня надмолекулярных образований наблюдать пока не удавалось. Однако есть указания [36], что макромолекулы даже «настолько обычных» полимеров, как полипропилен или полиметилметакрилат, способны имитировать по крайней мере первую ступень сборки — образование комплекса типа *coiled coils*. При этом обязательное условие — противоположность характера стереорегулярности макромолекул, образующих «стереокомплекс» (т. е. один компонент должен быть изотактическим, а другой синдио- или гетеротактическим).

3.1. Системные и информационные аспекты концепции самопрочтения

Исходя из изложенного выше, можно заключить, что конфигурационная информация первичной структуры играет во многом определяющую роль во всех дальнейших морфологических превращениях. В связи с этим возникает вопрос, реализуется ли здесь принцип «монады» и весь организм заложен в каждой из его клеток? Но ведь существует и ограничение по объему информации, заложенной в первичной структуре. Он отнюдь не так велик, чтобы обусловить все дальнейшие уровни морфогенеза.

Можно предположить, что на всех уровнях морфогенез обусловлен некими алгоритмическими определенными этапами. Очевидно, это не жесткий алгоритм, ибо, если исходить из алгоритмического представления информации (см. главу 2), то опять-таки прихо-

дим к ограничениям, приведенным выше. Скорее всего, реализована некоторая последовательность *вложенных* друг в друга алгоритмов (программ).

Представим себе, что, например, первичная структура макромолекулы и имеющаяся соответственно конфигурационная информация обуславливают сборку первичного уровня НМО. После сборки это НМО включается уже в новый алгоритм, составная часть которого — в первую очередь характеристики окружающей среды (вспомним высказывание Неймана, выбранное в качестве эпиграфа к данной главе). Сигналом к «переключению» программ может быть достижение определенных

размеров, формы, физико-химических характеристик и т. п. На рис. 8 представлена упрощенная схема такого алгоритма. При этом программы I, II, III должны существовать в некоем «свернутом» виде. Характерно, что происходит и взаимодействие между программами высшего и низшего уровней, т. е. возникают обратные связи, по-видимому, стабилизирующие набор возникающих структур.

В природе мы постоянно сталкиваемся с этим явлением — «переключением программ». Так, еще в 1857 г. знаменитый французский натуралист Фабр описывал [37] гиперметаморфозы жуков — маек: «предположим, что образ жизни личинки в разные ее возрасты различен. Тогда личка не только может, но и должна сопровождаться теми или иными изменениями в строении личинки. Первая личинка майки живет на теле пчелы-антофоры. Ее опасные странствования требуют быстроты движений, цепкости, и она обладает этими качествами (I программа морфогенеза). В ячейке пчелы нужно... уничтожить пчелиное яйцо. Острые изогнутые челюсти первой личинки прекрасно справятся с такой работой. Но вот пища становится иной: личинка начинает есть мед. Изменена среда, в которой она теперь живет: личинка плавает на поверхности липкой жидкости. Острые челюсти принимают

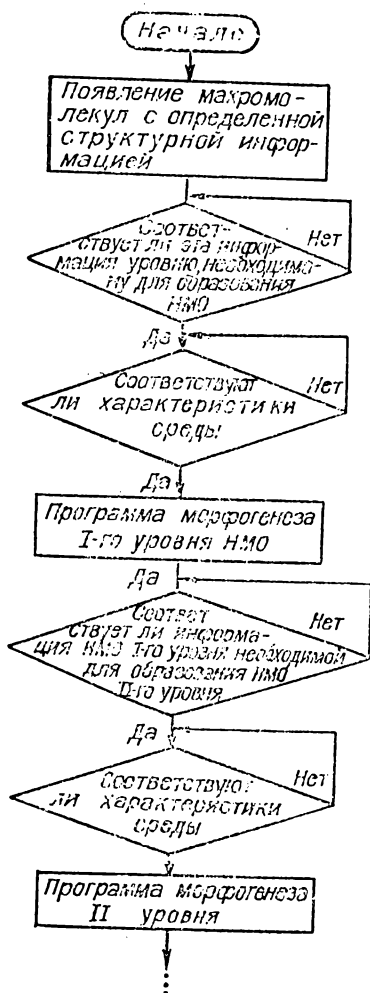


Рис. 8. Упрощенная схема алгоритма морфогенеза макромолекулярных систем.

форму ложек для черпания меда. Беспольные теперь ноги исчезают так же, как и глаза (не нужные в темноте) (II программа морфогенеза)». Далее протекают еще несколько морфогенезов. Здесь характерно, что в программах повсеместно участвует внешняя среда и что превращения несомненно дискретны, т. е. происходит четкая смена программ. Можно привести примеры такого «вложенного» программного обеспечения на самых разнообразных стадиях и уровнях биологического и, как мы показали выше, небиологического морфогенеза.

В работе [38] оценивается количество информации в клетке, зиготе и человеческом организме в целом. Так, по подсчетам, на один атом макромолекул, являющихся основой биологических структур, приходится 24,5 битов, на одну клетку *Escherichia coli* $\sim 10^{10}$ битов, на одну зиготу млекопитающего $I_1 \approx 10^{15}$ битов, на одну особь человеческого организма $I_2 \approx 10^{25}$ битов. Эльзассер [40] считал необъяснимым с физической точки зрения возрастание количества информации с I_1 до I_2 и соответствующую самопроизвольную убыль энтропии.

Волькенштейн [41] представляет изменение количества информации в открытой системе (а все описываемые системы являются по существу открытыми) как

$$\Delta I = \Delta_i I + \Delta_e I,$$

где член $\Delta_i I < 0$ выражает уменьшение информации вследствие процессов, для которых $\Delta_i S > 0$. В развивающемся организме $\Delta_e I > 0$.

Соответственно

$$I_2 = I_1 + \Delta_e I + \Delta_i I,$$

так как $I_2 \gg I_1$. Очевидно, что $\Delta_e I \gg I_1 - |\Delta_i I|$.

При этом информация черпается открытой системой из окружающей среды, энтропия которой возрастает.

Равен [42] пытается объяснить этот феномен, считая зиготу «передатчиком», а развивающийся из нее организм — «приемником» информации.

Здесь возникает целый ряд вопросов и неясностей, на которые упомянутые авторы ответов не дают.

Так, если верна гипотеза Равена, то потери информации за счет шумов, несомненно имеющих в системах, будут постоянно возрастать, все более и более будут накапливаться ошибки, приводя в конце концов к остановке развития или гибели системы. Что же касается привлечения дополнительной информации из окружающей среды, то здесь также есть противоречия.

Если использовать аналогии и взаимосвязи информационных и термодинамических величин, то получение дополнительной информации системой, уже обладающей значительной информацией (10^{10} битов) из внешней среды — раствора ионов и молекул с очень высокой энтропией (и соответственно малой информацией) — можно сопоставить с получением телом, нагретым до 1000°C , теп-

ла от тела, нагретого до 20 °С. Этого просто не произойдет. Чтобы тело, обладающее значительной температурой, еще нагреть, нужно ввести с ним во взаимодействие тело, нагретое до более высокой температуры. Так и с информацией. Чтобы система макромолекул, обладающая довольно высокой информацией, получила еще большее ее количество, надо ее привести во взаимодействие с системой, обладающей большим количеством информации (аналогия — ученик—учитель).

Известны также попытки объяснить возрастание информации при морфогенезе некоторым суммированием информации отдельных составляющих структуры, организующихся в структуру более высокого порядка. Это представление можно сопоставить с приведением в контакт нескольких тел, обладающих одинаковой температурой. Общая их температура не увеличится.

Эти и многие другие попытки производить суммирование количеств информации не имеют перспективы вследствие того, что очень часто складывают информации, принадлежащие различным классам. Это хорошо показано в теории измерений, когда осуществима лишь шкала «наименований», в которой любые действия (сложение, умножение, вычитание и т. п.) бессмысленны (см. главу 9).

Фон Нейман [15] пишет: «...нелегко представить себе, каким образом гены, являющиеся, по-видимому, объектом более низкого порядка, могут содержать описание человеческого организма, который должен возникнуть. Правда, в этом случае можно сказать, что ген осуществляет свое действие лишь внутри другого человеческого организма, и поэтому может содержать не полное описание того, что должно произойти, а только некоторые указания для нескольких альтернатив». Мы же отметим, что морфогенез происходит не менее успешно в случае отдельного яйца, а также небиологических макромолекулярных и даже низкомолекулярных систем.

3.1.1. ПРИНЦИПЫ ОДНОРОДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР В МОЛЕКУЛЯРНОЙ КИБЕРНЕТИКЕ

Заданный выше риторический вопрос: «Как же производится суммирование информации в молекулярных структурах?» остался бы наверняка без ответа, если бы не существовала теория однородных вычислительных структур [39]. Представляется целесообразным воспроизвести три основные аксиомы (подтверждаемые длительной практикой) этой теории [39].

1. Аксиома параллельности выполнения произвольного числа операций. Она распадается на три уровня.

1.1. Аксиома параллельности задачи означает, что всякая сложная задача может быть представлена в виде связанных между собой простых задач (подзадач). Кстати, эта аксиома — один из вариантов аксиом общей теории систем [125].

Однако между подзадачами существуют такие информационные связи сложной задачи, которые не могут быть устранены. Поэтому при решении данной задачи каждый элемент, вычисляющий подзадачу, при необходимости обменивается информацией с другим элементом.

Поскольку в этом случае информационные связи между подзадачами не разрываются, то фактически никакие ограничения на класс решаемых задач не налагаются.

1.2. Аксиома параллельности алгоритмов означает, что для любой сложной задачи может быть предложен параллельный алгоритм, допускающий ее эффективное решение.

1.3. Аксиома параллельности модели коллектива вычислителей означает, что эта модель может обеспечить сколь угодно высокую производительность за счет соответствующего роста количества вычислителей и параллельной их работы.

Для дальнейшего изложения нам не понадобится понятие «модель коллектива вычислителей». Поэтому мы избежим ее объяснения, занявшего бы много места. Интересующиеся могут найти сведения о ней в [39].

Исходя из последней аксиомы, можно заключить, что по мере роста сложности задач можно наращивать количество параллельно работающих элементов (решающих подзадачи) без ограничений.

2. Аксиома переменности логической структуры. На уровне элементов, вычисляющих подзадачи, эта аксиома означает принципиальную возможность создания для каждой задачи соответствующей структурной схемы решения.

3. Аксиома конструктивной однородности. На уровне задачи соблюдение аксиомы означает, что если возможно представление задачи в виде совокупности простых задач, связанных между собой (аксиома 1), то имеются приемы, при которых задача делится на части регулярным способом. При этом все простые подзадачи одинаковы по объему вычислений и связаны между собой одинаковыми информационными схемами обменов, а элементы, решающие подзадачи, и связи между ними также однотипны.

Далее в работе [39] доказывается, что на базе достаточно простых элементов, решающих задачи, возможно создание любого автомата Неймана, а также развивающегося автомата.

Здесь важно подчеркнуть, что однородные элементы не пассивно складывают содержащиеся в них количества информации, а взаимодействуют активно, на уровне переработки информации.

Таким образом, приведенные выше положения снимают поставленный вопрос: «Возможно ли развитие на основе достаточно простых и однотипных элементов?». Ответ положительный, однако необходимо взаимодействие этих элементов, для чего нужны так называемые в кибернетике одинаковые интерфейсы, обеспечивающие обмен информацией между ними. В гиперцикле [21] «интерфейсом» между молекулами являются наборы химических реакций, связывающие их. В развитии ДНК роль интерфейса выпол-

няют ферменты, рибосомы, РНК и т. п. Подчеркивая общность подхода, можно сказать, что и развитие человеческого общества на основе также однотипных человеческих особей зависит от интерфейса, роль которого выполняют средства общения: национальные языки, органы чувств, средства коммуникации и т. д.

СПОСОБЫ ПРОЧТЕНИЯ И ТОЧКИ ОТСЧЕТА ДЛЯ КОНФИГУРАЦИОННОЙ ИНФОРМАЦИИ

Как правило, большинство систем имеют ряд критериев, отображающих некие «пограничные» зоны, точки, поверхности, в которых при плавном изменении одного или ряда параметров происходят резкие скачкообразные изменения в их состоянии. В отдельных случаях такие точки поддаются описанию как точки бифуркации неких эволюционных уравнений, определяющих состояние систем. В других случаях, когда система превышает некий уровень сложности, явную бифуркацию трудно выделить. Однако в любом случае такие точки, области, поверхности являются неким, если так можно выразиться, «вторичным эталоном», позволяющим производить от себя «отсчет» определенных свойств систем.

Так, если первичными эталонами служат такие неизменные свойства макромолекулярных систем, как индивидуальные — исходная химическая структура, конфигурация макромолекул, интегральные — температуры плавления, растворения и т. п., то вторичными эталонами будут какие-то «островки стабильности», на которых мы остановимся ниже.

Все упоминаемые макромолекулярные системы — это, по существу, один из вариантов динамических систем, в которых для выполнения условий «автоматического саморегулирования» необходимы некие внутренние точки отсчета. Относительно последних происходит собственно регулирование. В качестве примера такого рода «вторичного эталона» можно привести блок автоматического поддержания линии горизонта в автопилоте.

Характерно, что в биологических системах наличие таких островков стабильности — необходимое условие самого их существования. Таковыми являются и гомеостат Эшби и гиперцикл Эйгена. Представляется полезным рассмотреть подобные кинетические точки отсчета в макромолекулярных системах и их участие в прочтении конфигурационной информации макромолекул.

4.1. Диаграмма Фишера для белков и ее распространение на химико-технологические проблемы

По оси абсцисс диаграммы Фишера (рис. 9) откладывается отношение концентраций гидрофобных и гидрофильных радикалов R_i в цепи макромолекулы, а по оси ординат — эффективный объем (или линейные размеры) этой цепи [30]. При этом очевидно, что эффективный объем — мера закрученности, или компактности,

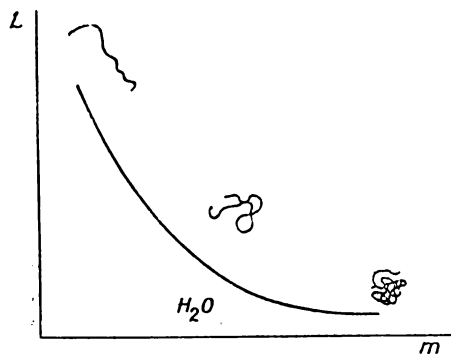


Рис. 9. Диаграмма Фишера для белков.

третичной структуры. Если состав белка таков, что он находится на правой ветви диаграммы (малый объем), то это значит, что в контакте со влагой он будет обязательно стремиться сжаться в компактную «глобулу», даже если его цепь каким-нибудь образом распрямили (такие белки из-за этого совершенно нецелесообразно использовать в качестве волокнообразующих). А фибриллярные (волоконистые) белки типа фиброина занимают левую ветвь диаграммы Фишера, т. е. в водном растворе имеют конформацию рыхлого клубка. Попытаемся выяснить «смысл» дислоцирования четырех типов аминокислотных остатков в кристаллизующемся пептиде, а остальных — в гибких неупорядоченных участках цепи. Глицин и аланин — гидрофобные аминокислоты; напротив, серин и тирозин благодаря наличию группы ОН растворимы в воде. Однако серин и тирозин плохо или вовсе не встраиваются в α -спираль. Будучи в составе кристаллизующегося пептида «в меньшинстве», они не могут воспрепятствовать образованию α -спирали, но сильно ослабляют ее устойчивость в водной среде. Ионогенные аминокислотные остатки глутаминовой и аспарагиновой кислот или лизина, аргинина и гистидина (содержащие основные группы) сосредоточены в неупорядоченных участках цепи.

Изложенных сведений достаточно, чтобы понять, каким образом получается паутина или нить натурального шелка. Шелкопряд приклеивает капельку секрета к листу или ветке, а потом вязкой, но жидкой струйкой вытягивает (а вовсе не выдавливает) все содержимое железы. В растягиваемой струйке возникает продольный градиент скорости (см. рис. 5), в котором слабо свернутые макромолекулы фиброина разворачиваются и ориентируются параллельно направлению растяжения. Наличие жестких анизометрических α -спиральных участков в немалой степени облегчает эту ориентацию. Как отмечено выше, состав этих участков обуславливает их неустойчивость. Под действием продольного гидродинамического поля кооперативная система водородных связей

между витками спирали рвется, и цепочка распрямляется. При этом ее свободная энергия возрастает. Чтобы она вновь уменьшилась и перешла в новое энергетически равновесное состояние, оказывается выгодным образование кристаллических участков в β -форме, где параллельно упакованные цепочки связаны поперечными водородными связями между пептидными группами. Итак, выстраивается следующая последовательность дискретных событий:

Появление продольного градиента скорости	Развертывание α -спиралей	Возрастание свободной энергии	Образование кристаллических участков в β -форме
Понижение свободной энергии			

Здесь очевидны переходы между изменением энтропийных (информационных) параметров макромолекулярной системы и ее энергетических параметров. Можно предположить, что динамика изменения описываемой системы подчиняется принципу волновой природы развития сложных систем, изложенному, к примеру, в работе [43].

Остается ответить на вопрос, как образуется максимум кристаллической структуры? Ведь для этого кристаллизующиеся пептиды должны оказаться точно один под другим. По-видимому, здесь решающую роль играют электростатические силы взаимодействия между ионогенными боковыми группами (см. рис. 5, в), а именно: цепочки скользят друг относительно друга до тех пор, пока не устанавливается наиболее выгодное расположение положительных и отрицательных заряженных участков, далее зафиксированное α - β переходом в кристаллизующемся пептиде. Отметим также, что «попутно» достигается оптимальная структура волокна.

Таким образом, мы показали, что в природном волокнообразующем материале — фиброине (наличие серицина не обязательно) закодирована и функция быть волокном, и сам «технологический процесс», т. е. программа, в результате которой получается волокно. При этом гидродинамическое поле выступает неким «считывателем» и инициатором начала работы программы преобразования, а для срабатывания электростатического механизма, обеспечивающего правильное взаимное расположение цепей, нужно некоторое понижение pH (примерно до 5) (это понижение, по-видимому, является также непременным атрибутом программы преобразования). Такое понижение обеспечивается специальными железами, имеющимися у шелкопряда вблизи выходов (фильер) основных желез.

Отметим, что затрата энергии на получение километра волокна или паутины совершенно ничтожна по сравнению с затратами энергии на получение такого же количества синтетического волокна. Это отличие обусловлено тем, что программа производства естественного волокна сформировывалась в процессе многих миллионов лет эволюции насекомых.

Как показано выше, коллаген способен *in vitro* к самопроизвольной сборке в волокна [44], причем механизм этой сборки напоминает механизм образования волокон из фиброина. Разница состоит в том, что коллаген из-за избытка пролина и оксипролина приобретает спиральную конформацию, отличную от α -спирали: образуются спирали типа полипролин II или полиглицин II (это не одно и то же, но геометрические параметры обеих структур практически тождественны) [3]. Устойчивой эта конформация становится лишь после объединения трех моноспиралей в одну тройную спираль — молекулу тропоколлагена с молекулярной массой около 360 000. А все превращения происходят при отсутствии растягивающего внешнего поля.

Представляется интересным обсудить с позиций молекулярной кибернетики две технологические проблемы, связанные с попытками утилизации некоторых белков молока или злаков для получения искусственных волокон. Эти довольно яркие примеры иллюстрируют, к чему может привести непонимание принципов конфигурационной информации при разработке конкретных технологий.

В 30-е годы, когда уже было известно, что средний состав всех белков примерно одинаков (около 20 аминокислот в близких пропорциях), казалось естественным, что шерсть или шелк (которым в природе соответствуют белки группы кератина или фиброина) можно с помощью стандартной технологии получить из любого белка. Появилось много патентов на получение искусственной шерсти из казеина (один из белков молока) или растительных белков, зачастую являющихся отбросами пищевой промышленности. При внешнем сходстве с шелком или шерстью все такие искусственные волокна или ткани проявляли одно крайне неприятное свойство: катастрофически «садились» или даже расползались в условиях повышенной влажности. Особенно забавен эпизод периода итало-абиссинской войны: после тропического ливня одежда итальянских солдат, изготовленная из казеиновой шерсти, полностью расползлась.

Для понимания сути случившегося обратимся к диаграмме Фишера. Белки, о которых идет речь, занимают на ней промежуточное или крайне правое положение. Уже по одному этому видно, что они не предназначены быть волокнами. С помощью современной технологии можно, в принципе, сделать волокно из любого белка. Но в контакте со влагой распрямленные молекулы приобретают столь большой избыток поверхностной энергии, что ее оказывается достаточно для преодоления сил межмолекулярного взаимодействия и даже ковалентных связей: цепи сворачиваются и ткань «садится» или расползается.

Итак, диаграмма Фишера — некая точка отсчета, позволяющая оценивать «активную» конфигурационную информацию макромолекул. Целесообразно отыскать такие точки в других областях физической химии и структурной механики полимерных систем. Несомненно, в таких диаграммах по осям ординат может откла-

дываться не только объем, но и другие параметры, а по оси абсцисс должен быть отложен, как правило, состав.

Проблема информационного предназначения макромолекул имеет и другую сторону. Такие волокнообразующие белки, как фиброин или коллаген, способны к почти самостоятельному превращению в волокна. Здесь сказывается несомненно пройденный белками путь эволюции: они стали именно волокнообразующими и поэтому способны к самоорганизации в волокна (самопрочтению конфигурационной информации). Но именно поэтому белки не всегда могут перерабатываться в искусственные волокна на установках для технологии химических волокон. Неучет такого рода информации, содержащейся в этих макромолекулах, может привести к превращению технологии, прекрасно подходящей в случае синтетических полимеров, в «антитехнологию» в случае натуральных.

Интересно, что в последние 10—15 лет вполне аналогичные варианты «антитехнологии» возникали при получении суперволокна из жесткоцепных полимеров, способных к образованию в растворе жидкокристаллической (нематической) мезофазы.

При продавливании прядильного раствора через технологическую фильеру развиваются огромные напряжения сдвига и поперечные градиенты скорости (отсутствующие в природном фибриллогенезе). При этом конфигурационная информация попросту «стирается» — мощные механические поля полностью дезавуируют слабые электростатические взаимодействия, благодаря которым макромолекулы должны были бы выстроиться единственно нужным (обусловленным миллионами лет эволюции!) образом. В результате оптимальная упаковка не может реализоваться, и волокна уступают по комплексу прочностных и эластических свойств природным. Данная проблема, несомненно, выходит за рамки чисто теоретических рассуждений. Так, в процессе кокономотания на фабриках натурального шелка теряется примерно 1/3 наличного фиброина, а хорошего метода утилизации таких «отходов» путем переработки в искусственные волокна по-прежнему нет. Из-за этого теряются большие средства.

Грубая модель изложенной выше ситуации — строительство крупнопанельного дома. Он довольно быстро собирается из заранее подготовленных панелей. Но нелепо было бы делать из панелей кирпичи и затем строить кирпичный дом. Примерно так же нелепо подвергать технологическому насилию те полимеры, которые могут в результате самопрочтения содержащейся в них конфигурационной информации собраться в изделие, в данном случае в волокно. Следовательно, если на химической стадии изготовления задать полимеру определенный запас хотя бы структурной информации (это можно сравнить с заблаговременным изготовлением панелей), то можно существенно облегчить последующую «аппаратную» стадию.

4.1.1. ПРИНЦИП ПОСТОЯНСТВА ИНФОРМАЦИОННО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПАРАМЕТРА*

В работе [11] один из авторов предложил следующий инвариант:

$$IT \simeq \text{const}, \quad (4.1)$$

где I — количество информации, введенной в молекулу; T — степень энергетических затрат в технологическом процессе. Это соотношение отражает путь непосредственного приложения молекулярной кибернетики к технологии. При этом очень малым I соответствует сегодняшняя громоздкая и энергоемкая технология. Напротив, малым T должна соответствовать технология, если можно так выразиться, кибернетическая, когда источник энергии, машина и материал будут представлять собой единое целое. Эта технология должна основываться на самом главном свойстве полимеров как особой формы конденсации вещества, — их «аниэнтропийности», одним из проявлений которой является способность к самоупорядочению.

Соотношение типа (4.1) можно вывести достаточно строго, используя понятие «организации» системы. Так, степень упорядоченности или организации называются разность [45]

$$O = S_{\max} - S_t, \quad (4.2)$$

где Q — абсолютная организация системы; S_{\max} — максимальная энтропия полностью дезорганизованной системы; S_t — текущая неопределенность системы, предпочитающей в данный момент времени определенное состояние (можно определить этот параметр так же, как условную энтропию системы — $S_t = S(\Sigma_0/\Sigma_t)$).

При изучении биологических процессов мы очень часто уподобляемся лицам, которые наблюдают за работой ЭВМ с момента, когда ранее введенная программа вызывается оператором и в считанные мгновения решает сложнейшую поставленную задачу. Долгие часы, а часто дни программирования и отладки программы уходят от их внимания. Так и мы, видя совершенство и отработанность биологических процессов, часто забываем, что последние являются результатом миллиардов лет «отладки» программы их выполнения. Это в значительной степени относится и ко всем процессам, в которых происходит повышение организации исходного продукта, вещества, изделия, организма.

Условно можно представить технологический процесс в виде, показанном на рис. 10. При этом организация, которую получает продукт, пройдя через все стадии технологического процесса, равна организации, уже имеющейся у исходного продукта с добавлением организации, введенной за счет воздействия на него данного технологического процесса:

$$O_{\tau.n} + O_{\pi_i} = O_{\pi_i}. \quad (4.3)$$

* Данный раздел написан совместно с В. Л. Кузнецовой.

При этом $O_{п_1}$ определяется выражением

$$O_{п_1} = S_{п_1 \max} - S_{п_1}. \quad (4.4)$$

Определить $O_{т.п}$ довольно-таки сложно. По крайней мере, известных общепринятых оценок этого параметра не существует.

Для определения $O_{т.п}$ вернемся к введенному в главе 2 алгоритмическому определению информации. Абсолютная организация системы, согласно подходу Колмогорова [11], выражается количеством информации в полностью дезорганизованной системе y_g относительно организованной до определенной степени системы y_0 .

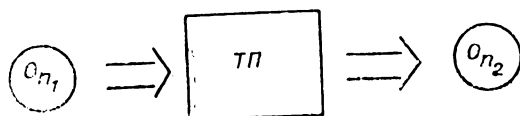


Рис. 10. Упрощенное представление о технологическом процессе.

$$O_{т.п} = I(y_0; y_g). \quad (4.5)$$

В данном случае y_g — отсутствие технологического процесса; y_0 — организованный технологический процесс. Исходя из алгоритмического представления информации, организацию технологического процесса можно определить из формулы

$$O_{т.п} = \min_{\varphi(p)=y_g} l(p) - \min_{\varphi(p)=y_0} l(p). \quad (4.6)$$

В данном случае $\min_{\varphi(p)=y_g} l(p)$ — минимальная длина программы, необходимой для описания организационного технологического процесса; $\min_{\varphi(p)=y_0} l(p)$ — минимальная длина программы, необходимой для описания полностью дезорганизованного, или отсутствующего, технологического процесса (ТП). Кроме того, $\min_{\varphi(p)=y_g} l(p)$ можно определить некоторой системой исходных узлов, блоков, которые будут создаваться ТП. Описание $\min_{\varphi(p)=y_0} l(p)$ осуществимо алгоритмически, т. е. строго последовательно. Напротив, $\min_{\varphi(p)=y_0} l(p)$ определить совсем не так просто. Ведь развитие существующего ТП может идти разными путями, которые, вполне вероятно, будут всегда оптимальными. Такой процесс алгоритмом описать нельзя, это эвристика.

Согласно [7], параметр $\min_{\varphi(p)=y_g} l(p)$ для описания эвристического процесса можно определить, исходя из понятия «реализация эвристического процесса». При этом алгоритмическая информация, содержащаяся в данном процессе, будет определяться длиной программы, которой можно описать произошедшую реализацию данного эвристического процесса.

Хочется подчеркнуть, что данный подход является общесистемным, и совершенно аналогично можно описывать процесс

биологического морфогенеза, только в этом случае «черным ящиком» вместо ТП на рис. 10 будет морфогенетический процесс (МП), и уравнение (4.3) будет иметь вид

$$O_{\text{м.п}} + O_{\text{п}_1} = O_{\text{п}_2}. \quad (4.7)$$

При этом $O_{\text{м.п}}$ будет определяться аналогично (4.6), только параметр $\min l(p)$ будет найден как «реализация эвристического процесса морфогенеза, полученная в результате эволюции биологической системы».

Представим себе, что организация результирующего продукта $O_{\text{п}_2}$ постоянна, т. е. в результате технологического процесса производится некоторый продукт с определенными свойствами. Тогда вполне очевидно, что при значительной организации $O_{\text{т.п.}}$ вносимой в технологическом процессе в продукт (и соответствующих этому адекватно энергетических затрат), исходная организация продукта $O_{\text{п}_1}$ может быть малой. И напротив, при значительной исходной организации продукта $O_{\text{п}_1}$ вносимая при ТП организация (и соответствующие энергетические затраты) может быть значительно меньше.

Отметим, что уравнения (4.3) и (4.7) являются достаточно общими и прямо не отражают истинного вида соотношения энергетических затрат в течение технологического процесса или биологического морфогенеза с количеством информации, содержащимся в исходном веществе. Однако представляется, что более строгий вывод этих зависимостей более целесообразно провести в главе 9, посвященной вопросам «кибернетической технологии» с привлечением ряда дополнительных понятий и параметров.

Вышеизложенное относится к случаю, когда имеющаяся в исходном продукте (веществе) организация используется в ТП. В случае же (к сожалению, значительно более распространенном), когда данная организация не используется, в ТП необходимо расходовать энергию и другие ресурсы еще и на дезорганизацию исходной организации. При этом уравнение (4.3) примет вид

$$O_{\text{т.п.}} - O_{\text{п}_1} = O_{\text{п}_2}. \quad (4.8)$$

В случае естественных полимеров это приводит к стремлению промышленности идти по линии наименьшего сопротивления. Так как разгадать, прочитать и использовать информацию, содержащуюся в исходном полимере, затруднительно и непривычно, то упор делается на чисто синтетические полимерные изделия. Тут хотя бы не нужны затраты на устранение той исходной информации, которая содержится в макромолекулах исходного (естественного) полимера.

САМООРГАНИЗАЦИЯ И ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ. ПОЛИМЕРНЫЕ ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ И СУПЕРКРИСТАЛЛЫ

Ниже мы рассмотрим различные аспекты самоорганизации макромолекулярных систем. Существует много различных представлений о самоорганизации. Так, Винер [46] считал, что: «...самоорганизация — это процесс втягивания в синхронизм», т. е. образования единого ритма работы многочисленных и разрозненных до этого элементов системы. Ивахненко [47] дает такое определение: «Самоорганизация — это процесс самопроизвольного увеличения порядка, или организации, в системе, состоящей из многих элементов, происходящий под воздействием внешней среды».

Вот как происходит самоорганизация на самых нижних уровнях макромолекулярных систем.

Исходя из представлений о процессе самоорганизации, вполне очевидно представить, что для получения достаточного условия его возникновения система должна состоять из элементов, обладающих некоторой организацией на своем уровне:

$$O_{\min} = S_{\max} - S_{t_3}, \quad (5.1)$$

где S_{\max} — максимальная энтропия макромолекулы в полностью дезорганизованном состоянии, т. е. с реализованными всеми возможными степенями свободы. Это, по-видимому, энтропия молекулы, имеющей все гибкие связи в цепи. S_{t_3} — энтропия макромолекулы, обладающей определенным соотношением гибких и жестких связей.

Исходя из представлений, что энтропия системы равна сумме энтропий входящих в нее элементов (см. например, [48]), можно определить

$$S_{t_c} = S_1(\alpha) + S_2(\beta) + \dots + S_n(\omega), \quad (5.2)$$

где S_{t_c} — текущая энтропия системы макромолекул; $S_1(\alpha)$, $S_2(\beta) \dots$ — текущие энтропии элементов системы с состояниями со-

ответственно $\alpha, \beta \dots \omega$. Естественно, что и для максимальных энтропий существует аналогичное соотношение:

$$S_{\max_c} = S_{1\max}(\alpha) + S_{2\max}(\beta) + \dots + S_{n\max}(\omega), \quad (5.3)$$

где S_{\max_c} — максимальная энтропия системы макромолекул; $S_{1\max}(\alpha), S_{2\max}(\beta) \dots$ — максимальные энтропии элементов системы с состояниями соответственно $\alpha, \beta \dots \omega$. Исходя из (5.2) и (5.3), можно вывести соотношение

$$S_{\max_c} - S_{ic} = O_c, \quad (5.4)$$

показывающее, что существует какое-то значение организации макромолекулярной системы, при котором может произойти ее самоорганизация, например переход в жидкокристаллическое состояние, а это значение зависит от организации макромолекул, входящих в систему.

Значения $O_{s\min}$ для макромолекул, входящих в систему, можно оценить, исходя из их физических характеристик.

По аналогии с тем, как наиболее плотная упаковка спичек в коробке получается при их параллельном расположении, жесткие стержневидные молекулы — «тактоиды» — в растворе стремятся к состоянию с минимальной свободной энергией, что для них адекватно требованию минимума свободного объема. По достижении некоторой концентрации полимера в растворе происходит спонтанное образование нематической жидкокристаллической фазы, для которой характерна параллельная ориентация стержневидных молекул. Если заторможенность внутреннего вращения в полимерных цепях характеризовать разностью энергий гош- и транс-ротамеров ϵ , то параметр гибкости будет иметь вид

$$f = (z - 2) \exp(-\epsilon/kT) / [1 + (z - 2) \exp(-\epsilon/kT)], \quad (5.5)$$

где z — координационное число решетки в случае упорядоченной системы или квазирешетки. В работах Флори [19] показано, что при $z=6$ имеет критическое значение:

$$f^* = 1 - 1/z = 0,63, \quad (5.6)$$

ниже которого макромолекулы при достижении их определенной концентрации ϕ_2^* должны упаковываться параллельно и образовывать жидкий кристалл-нематик.

Для абсолютно жестких макромолекул ($\epsilon=0, f=0$)

$$\phi_2^* = \frac{8}{p} \left(1 - \frac{2}{p} \right), \quad (5.7)$$

где p — осевое соотношение макромолекул, моделируемых правильными цилиндрами. По мере роста f повышается и ϕ_2^* и при $f=0,63$ ϕ_2^* обращается в единицу, т. е. нематическая фаза может быть реализована только при отсутствии растворителя. В случае

$f > 0,63$ нематическая фаза ни при каких обстоятельствах спонтанно возникнуть не может.

В работах [49—51] предложено учитывать и наличие избирательных взаимодействий, а также внешних полей, которые могут оказывать влияние на параметр. Кроме того, предложено определять ϵ как энергию одного эффективного излома поначалу полностью распрямленной макромолекулы [51]. Отметим, что такой подход основан на кибернетических представлениях, изложенных выше. «Активным» оказывается параметр, выражающий соотношение между некоторым предельным состоянием и текущим. Общность этого подхода подтверждает такой пример: нетрудно представить излом спиральной конформации в результате перехода $ggg \rightarrow gtg$, при котором доля транс-ротамеров увеличивается, а не убывает, а последнее будет противоречить подходу Флори.



Рис. 11. Модели макромолекул.

Параметр $f = 0,63$, являющийся, по-видимому, критерияльным параметром условия возможности самоорганизации системы макромолекул, соответствует какому-то среднему уровню «организации» последних, при котором система при соблюдении остальных необходимых условий может спонтанно перейти в анизотропное состояние. Он также разделяет условно все многообразие линейных полимеров на гибкоцепные и жесткоцепные. Гибкоцепные, имеющие $f > 0,63$, ни при каких условиях не могут сами по себе образовать нематическую фазу. Полужесткие и жесткие макромолекулы с $f < 0,63$, напротив, при некоторой критической концентрации обязательно образуют нематическую фазу (при соблюдении определенных условий, которые в принципе нетрудно обеспечить). Все это имеет существенное значение при разработке оптимальных технологий получения анизотропных полимерных систем.

Вместе с тем исходя из трактовки ϵ как энергии одного эффективного излома, безоговорочное принятие критического значения $f = f^* = 0,63$ может привести к несообразностям. Так, этот критерий для гибкоцепных полимеров, изображаемых сегментальной или персистентной моделью, может войти в противоречие не только с фактами, но даже и логикой, ибо для большинства гибкоцепных полимеров сегмент включает от 5 до 15 элементарных повторяющихся звеньев. Это никак не отвечает доле гибких связей менее 0,63 (уже при степени полимеризации сегмента 5 эффективное значение f именно как молярной доли гибких связей должно

быть меньше 0,2), хотя известно, что сами по себе эти гибкоцепные полимеры мезофазу не образуют. Далее мы будем рассматривать только макромолекулы, ограниченные моделью, показанной на рис. 11, а принимая во внимание, что описание остальных вариантов должно включать учет большего числа мезогенных факторов, а это несколько мешает построению ясной физической модели явления.

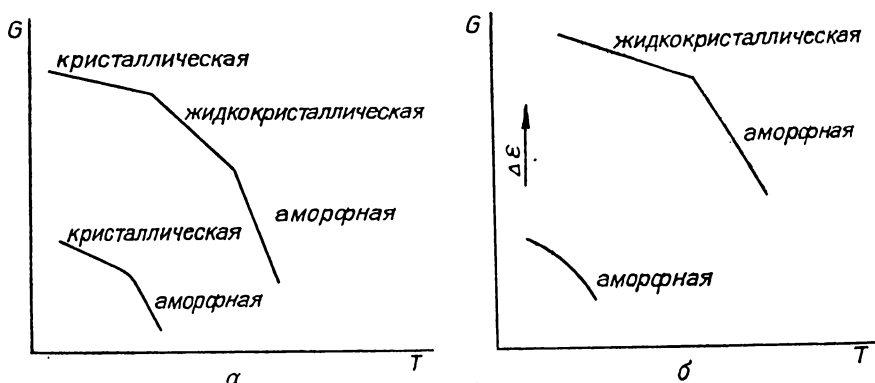


Рис. 12. Зависимость свободной энергии системы полимер—растворитель от температуры:

a — кристаллизующийся полимер; b — некристаллизующийся полимер.

Рассмотрим диаграмму энергии Гиббса—температура (или давление) (рис. 12, a). Не фиксируя внимание на абсолютном значении критерия f^* , заметим, что энергия ϵ в формуле (5.5) не должна быть постоянной и может меняться с концентрацией, если параметр взаимодействия полимер—растворитель зависит от нее, или в результате «перекачки» в макромолекулы энергии внешнего, например механического, поля. Это видно из формул (5.8), (5.9), где $\Delta\chi$ — изменение параметра Флори—Хаггинса (например, при превращении спираль—клубок в полипептидах), а $\Delta\epsilon$ — «добавка» к внутренней энергии за счет внешнего поля:

$$f = f_0 \exp(\pm \Delta\chi_1 \varphi_1 / kT) / [1 - f_0 + f_0 \exp(\pm \Delta\chi \varphi_1 / kT)]; \quad (5.8)$$

$$f = f_0 \exp(-\Delta\epsilon / kT) / [1 - f_0 + f_0 \exp(\Delta\epsilon / kT)]. \quad (5.9)$$

Еще более наглядно это заметно при рассмотрении зависимостей по методу Димарцио [53]. Как видим, за счет добавки энергии различного происхождения систему можно «перебросить» с фазовых линий, характерных для полимера гибкоцепного, на фазовые линии, характерные для полимера, способного к образованию мезофазы, только из-за повышенной жесткости цепей. Точки переходов достаточно отчетливо видны на диаграмме (рис. 12, a). Здесь возникает вопрос, является ли эта переброска фазовым переходом? Представляется целесообразным рассмотреть эти процессы с позиций диссипативных структур [54]. Для этого вместо f

введем более удобный для кинетических расчетов параметр β , определяемый из следующих соображений.

Длина статистического сегмента Куна [44] является также характеристикой гибкости макромолекулы и достаточно легко определяется на опыте. Если принять эту длину за параметр A , то макромолекулу со среднеквадратичным расстоянием между концами $\langle h^2 \rangle^{1/2}$ можно считать эквивалентной свободно-сочлененной цепи из N сегментов длиной A и степени полимеризации χ . При этом очевидно, что $\chi N = n$ — степень полимеризации макромолекулы:

$$\langle h^2 \rangle^{1/2} = AN^{1/2}. \quad (5.10)$$

Характерно, что гауссов характер цепи имеют уже при $N \approx 10$ [55]. Параметр $\langle h^2 \rangle^{1/2}$ определяется при соблюдении 9 условий усреднения — по максвеллову распределению конформаций. Заменяя дискретное значение расстояния между концами клубка h его приведенной величиной, мы получим параметр

$$\beta = h/L, \quad (5.11)$$

где L — контурная длина цепи, $L = NA$. Для гауссовых клубков β , как и h , распределено по закону Максвелла, наиболее вероятное значение β , соответствующее максимуму распределения,

$$\langle \beta \rangle = \left(\frac{3}{2} N \right)^{-1/2}, \quad (5.12)$$

а среднеквадратичное

$$\langle \beta^2 \rangle^{1/2} = AN^2/L = N^{-1/2} \quad (5.13)$$

несколько больше $\langle \beta \rangle$.

При $f=0$, $\beta=1$, а при стремлении f к максимуму значение β минимально. При достаточно больших степенях полимеризации связь между f и $\langle \beta^2 \rangle^{1/2}$ определяется как

$$\langle \beta^2 \rangle^{1/2} = \frac{1}{N} \cdot \frac{2-f}{f}. \quad (5.14)$$

Соотношение (5.14) корректно при $n > 100$ и выше, т. е. при заведомом $n \gg 10$. В этом случае, что представляется важным, существует однозначная зависимость между $\langle \beta \rangle$ и f , а следовательно, и ϵ . Для цепей, не удовлетворяющих данному критерию, обычно относимых в разряд олигомеров (что на самом деле не совсем так, поскольку в жестких макромолекулах N может быть меньше 10 при очень высоких n), однозначная связь между f и β утрачивается, так как даже гибкая, но короткая цепь имеет дефицит конформационной энтропии и не может свернуться в клубок.

Итак, f отличается от β тем, что первый параметр является абсолютной мерой гибкости (внутренней энергии ϵ) и не зависит

от молекулярной массы μ или степени полимеризации n , а β от μ зависит, причем, как это видно из выражения

$$\frac{d\beta}{dN} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3}} N^{-3/2} \equiv -\sqrt{G} \left(\frac{n}{\lambda}\right)^{-3/2}, \quad (5.15)$$

эта зависимость особенно сильна в «олигомерной» области.

Параметр β также имеет некоторое критическое значение $\beta^* \approx 0,25$, что и соответствует примерно десяти статистическим элементам в цепи или границе (обусловленной любыми причинами!) между завершенными и незавершенными статистическими клубками. Подчеркнем, что многие системные уравнения, определяющие динамические или статические макромолекулярные характеристики полимерных систем, претерпевают при $\beta = 0,25$ удвоение решения (бифуркацию) (рис. 13). Резко выраженная бифуркация соответствует переброске, представленной на рис. 12, а, а степень резкости этого перехода

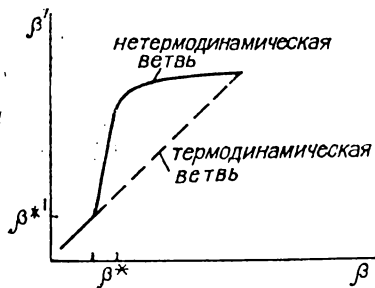
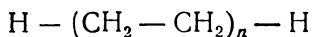


Рис. 13. Зависимость параметра β' от β (пояснения в тексте).

определяет, является ли он фазовым превращением в обычном понимании этого термина.

Как следует из (5.15), убывание β с μ , N или n идет по гиперболическому закону, имея асимптотой ось X и некоторую неопределенность при малых μ или n . Если n -парафины считать олигомерами этилена и придать n смысл степени полимеризации (а не числа углеродных атомов в парафиновой молекуле, как это делается при описании парафинов), то общая формула для n -парафинов примет вид



для полиэтиленового сегмента $\lambda = 8,3$ [14]; следовательно, при $N = 10$ $n = 83$, т. е. в цепочке содержится около 170 атомов углерода. Аналогичные оценки можно произвести для других гибкоцепных полимеров и найти их степень полимеризации или μ , соответствующую «критическому» значению $\langle \beta \rangle$. Поскольку все известные n -парафины оказываются в заведомо сверхкритической области $\langle \beta \rangle$, то вполне понятно, что они кристаллизуются с распрямленными цепями, образуя две решетки. Это верно и для других олигомеров.

Таким образом, можно заключить, что вблизи $N = 10$ или $\langle \beta \rangle = 0,25$ расположена естественная «физическая» граница олигомеров и собственно полимеров. Можно легко рассчитать n или μ , исходя из известных значений λ . Поэтому вблизи этих значений n и μ наблюдаются скачкообразные изменения микро- и макроскопических свойств полимерных систем. Так, исходя из ра-

боты [55], можно заметить, что разные макроскопические параметры претерпевают разрывы или иные особенности в функции от молекулярной массы, но при несовпадающих абсолютных значениях M . Здесь, несомненно, играет роль неизбежная полидисперсность в полимерах и разные типы усреднения для соответствующих параметров.

5.1, Продольное течение, вынужденная анизотропия и топоморфизм гибкоцепных полимеров

Известно, что гибкоцепные полимеры, например полиэтилен или полипропилен, в принципе способны к образованию двух форм кристаллического порядка, характеризующимся одной и той же элементарной ячейкой, но различной конформацией цепей в решетке — складчатой (кристаллы со сложенными цепями, КСЦ) и вытянутой (кристаллы с вытянутыми цепями, КВЦ). По достаточно очевидным причинам свободная энергия двух крайних форм кристаллов должна различаться, уменьшаясь при переходе от КСЦ в КВЦ. Это и есть топоморфизм. Его проявления хорошо видны на фазовых диаграммах свободная энергия—температура, свободная энергия—давление (рис. 14, а, б). Для этих диаграмм характерно превращение точки фазового перехода в область, внутри которой должны быть заключены «промежуточно» формы-КСЦ с увеличившейся длиной распрямленных участков. Слово «промежуточные» заключено в кавычки, так как из анализа фазовых диаграмм следует, что должна существовать истинная промежуточная форма — «настоящая мезофаза», скорее всего нематического типа. Она непосредственно наблюдалась рядом авторов при высоких давлениях (например [56]) и характеризуется для поли-

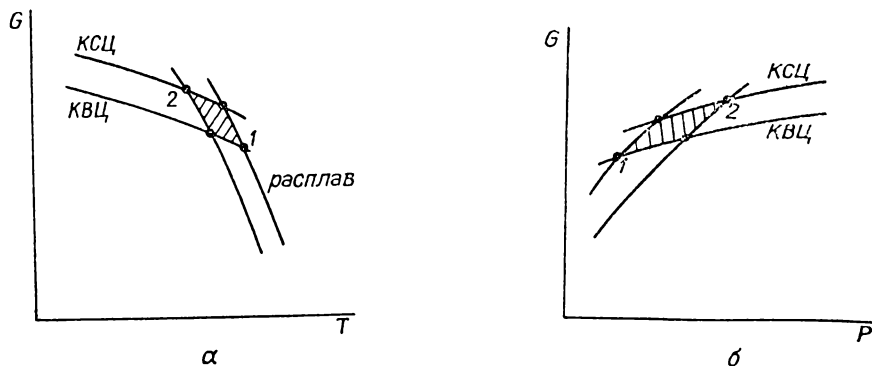


Рис. 14. Зависимость свободной энергии системы полимер—растворитель:

а — от температуры; б — от давления (КСЦ — кристаллы со сложенными цепями, КВЦ — кристаллы с вытянутыми цепями).

этилена расщеплением рентгеновского рефлекса [110] и появлением сателлитного рефлекса при 20,5 °С, отвечающего гексагональной упаковке. Необходимость существования такой мезофазы непосредственно следует из анализа фазовых диаграмм (рис. 14, а, б). Дело в том, что если КВЦ соответствует пониженная свободная энергия, то после плавления «естественным» для цепей является состояние клубка. Следовательно, чтобы удовлетворить фундаментальному требованию непрерывности термодинамического потен-

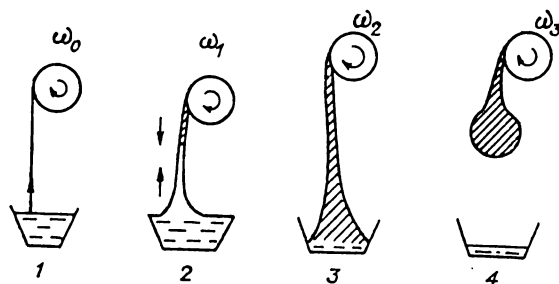


Рис. 15. Опыт растяжения раствора полимера.

циала при изменении температуры или давления, необходимо допустить существование между КВЦ и изотропным расплавом истинно промежуточного состояния — нематической мезофазы. Наблюдать ее образование удобнее всего в динамических условиях, при растяжении растворов или расплавов, в особенности некристаллизующихся полимеров. Типична схема опыта и его непосредственного результата — так называемой «ориентационной катастрофы» [50] (рис. 15). За образованием новой фазы можно наблюдать по движению навстречу течению фронта «кристаллизационной волны». В случае растворов превращение сопровождается интенсивным выжиманием из струи растворителя. Если полимер — кристаллизующийся (в описываемых опытах использовался фиброин шелка), то схеме опыта соответствует «переброска», показанная на рис. 12. Но если полимер некристаллизующийся (полиметилметакрилат или полистирол), то фазовая диаграмма G — T трансформируется: на ней исчезает «кристаллическая» линия (рис. 12, б). Здесь возникает вопрос, насколько позволительно называть это состояние мезофазой? Отметим, что в аморфных системах она может существовать в двух режимах: динамическом, когда производится непрерывная «перекачка энергии» (это, по-видимому, один из случаев «стабильности вдали от равновесия») внешнего поля во внутреннюю энергию цепей, приводящая к повышению их эффективной жесткости и фазовому переходу по достижении $\beta = \beta^*$, и в покое, если по удалении растворителя или охлаждении расплава межцепные взаимодействия достаточно сильны, чтобы превратить коллапс ориентированной системы (другая «ориентационная катастрофа») под влиянием внутренних напряжений энтропийной природы. В простых системах типа полисти-

рола сохранение такого «твёрдо-нематического состояния» возможно при очень высоких степенях полимеризации (выше 10^5) и облегчается при наличии второго, родственного по структуре (например, поли- α -метилстирола) компонента значительно меньшей степени полимеризации (10^3). В последнем случае при растяжении струи расплава происходит сегрегация высокомолекулярного компонента (процесс, аналогичный выжиманию струи из растягиваемого раствора) с образованием вторичной «супернематической»

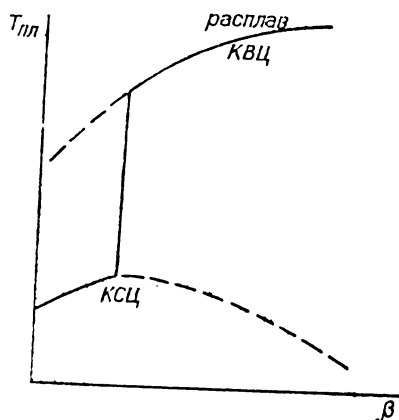


Рис. 16. Зависимость температуры плавления полимера от степени предварительного растяжения расплава (КВЦ — кристаллы с вытянутыми цепями, КСЦ — кристаллы со свернутыми цепями).

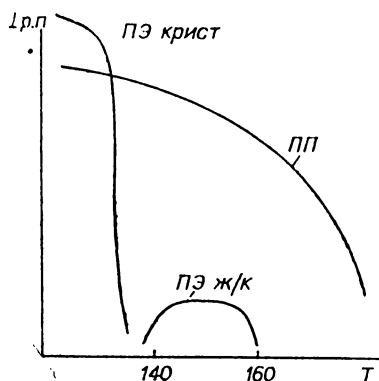


Рис. 17. Зависимость интенсивности рефлекса $20,5^\circ\text{C}$ рентгенограммы полимера от температуры.

структуры, представляющей собой каркас из фибрилл высокомолекулярного компонента с вытянутыми цепями. При некоторых условиях его можно выделить. Оценки прочности в пересчете на этот каркас дают при температуре жидкого азота величины порядка 400 кг/мм , что составляет примерно половину теоретической прочности ПС [57]. Совершенно такой же, но уже вполне стабильный каркас из КВЦ образуется при ориентационной кристаллизации полиэтилена или полипропилена [52], для которых зависимость температуры плавления от степени предварительного растяжения расплава, т. е. β , показана на рис. 16. Очевидно, что мезофаза должна как предшествовать образованию КВЦ, так и следовать непосредственно за их плавлением. Удобнее всего наблюдать ее рентгенографически и в изометрических условиях. Как можно было ожидать, область ее существования для полиэтилена очень узка, но регистрируется четко, причем не только по «гексагональному» рефлексу, но и на термограммах [58]. Еще удобнее наблюдать эту мезофазу в этилен-пропиленовых композициях полимеризационного совмещения [59], содержащих небольшую долю блок-сополимера, обеспечивающего взаимодействия компонентов

или микрофаз. На дифрактограмме такой композиции с молярной долей полиэтилена 30% при разных условиях вытяжки видно, как по мере отжига проявляется «гексагональный» рефлекс при 20,5 °С. Полипропиленовый каркас при наличии блок-сополимера играет при этом роль своего рода «держателя» полиэтиленового расплава просто за счет разницы температур плавления обоих полимеров. Условия в этой системе выше температуры плавления чистого полиэтилена, но ниже температуры плавления полипропи-

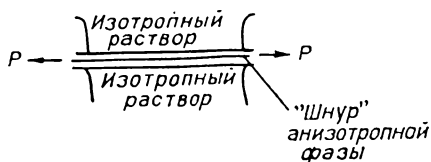


Рис. 18. Возникновение анизотропной фазы при растяжении раствора полистирола в режиме продольного течения между двумя струевыми вискозиметрами, работающими на всасывание.

лена и на микроуровне имитируют изометрические. На рис. 17 показана область наблюдения гексагонального рефлекса, которая должна соответствовать области устойчивости ориентированного сплава. С упомянутыми оговорками его можно трактовать как мезофазу.

Образование мезофазы в динамических условиях можно рассматривать с позиций термокине-

тического «принципа эквивалентности» [50], согласно которому система растягиваемых механическим или гидродинамическим полем гибких цепных молекул ведет себя так же, как система идентичных им по строению жестких молекул в покое.

Принципы термокинетики («релаксационной термодинамики») были развиты в работах одного из авторов и Г. К. Ельяшевич. С самых общих позиций их можно трактовать как прямое следствие теории относительности в той ее части, где постулируется невозможность раздельного рассмотрения пространства и времени. Применительно к соотношениям классической термодинамики это означает, что при анализе изменений термодинамических потенциалов при переходе из одного состояния в другое нельзя пренебрегать скоростью этих изменений, равно как и другими кинетическими параметрами, в первую очередь градиентами скорости при продольной или сдвиговой деформации отправной системы.

На рис. 18 изображено возникновение в динамических условиях анизотропной фазы в растворе высокомолекулярного полистирола в режиме продольного течения между двумя струевыми вискозиметрами, работающими на всасывание. О том, что на самом деле это фазовое превращение, связанное с разворачиванием цепей, свидетельствуют возможности ее плавления при повышении температуры [60]. Если рассмотреть диацетат целлюлозы, то его самоудлинение представляет собой, по существу, тот же процесс, но он разделен во времени. При непосредственном наблюдении фазового превращения в диацетате целлюлозы, обусловленного разворачиванием цепей, реологическими методами, например при растяжении в режиме постоянной скорости или постоянного напряжения (или силы), этот переход можно связать с проявлением «отрицательной продольной вязкости». Действительно, в опре-

деленном диапазоне растяжений система удлиняется без приложения внешнего напряжения (рис. 19).

Если соображения, основывающиеся на бифуркации при критических степенях разворачивания цепей, верны, аналогичные эффекты должны проявляться на кривых растяжение—удлинение обычных систем; необходимо только правильно выбрать режим продольного течения. Появление на соответствующих кривых сингулярностей, указывающих на возникновение «отрицательной продольной вязкости», было бы дополнительным свидетельством общности перехода из изотропного в нематическое состояние для гибкоцепных полимеров в динамических условиях. В заключение отметим, что как системы КВЦ, так и высокопрочные системы с каркасом из сверхориентированного сверхвысокомолекулярного полистирола способны к значительному перегреву относительно «обычных» температур плавления или стеклования; перегрев можно объяснить как с чисто кинетических позиций, так и существованием анизотропной фазы.

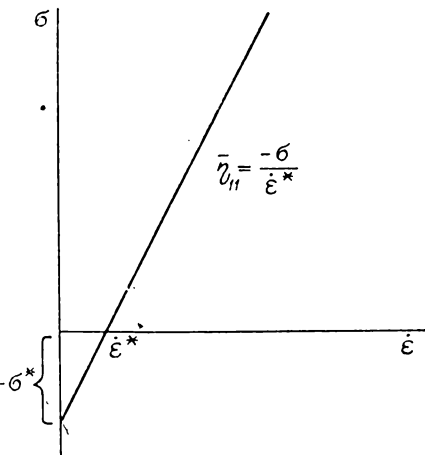


Рис. 19. Зависимость напряжения от степени растяжения диацетата целлюлозы.

5.2. Суперрешетки в гомодисперсных блок-сополимерах

Последний класс высокоупорядоченных гибкоцепных полимерных систем, подлежащий рассмотрению, — так называемые суперрешетки в гомодисперсных блок-сополимерах, образующиеся в результате термодинамической сегрегации разнородных блоков [61]. Хотя эти системы и принято относить к полимерным жидким кристаллам [62], уже само это отнесение оспоримо. Это видно, например, из рис. 20, где изображены простейшие формы «прямых» и «инвертированных» суперрешеток — кубическая упаковка шаров,

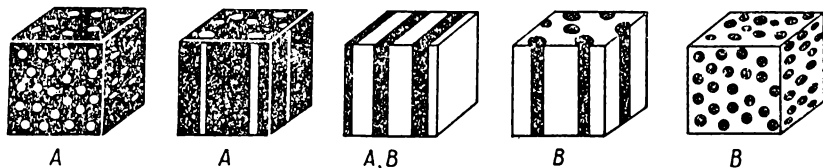


Рис. 20. Различные типы суперструктур сополимеров типа AB (A — стирол, B — бутадиев).

гексагональная упаковка цилиндров и последовательная упаковка пластинок. С точки зрения физики твердого тела это типичные низкоразмерные системы, соответственно трех-, дву- и одномерная. Так как внутренняя структура блоков, образующих шары, цилиндры или пластинки, может быть совершенно неупорядоченной, отнесение этих суперрешеток к категории мезофаз уже совсем ничем не оправданно: упорядоченнее суперрешетки нет никакой фазы. Другое дело, что расплавить ее обычными способами довольно трудно [61—63]. С точки зрения физики кристаллов суперрешетки — это полноценные кристаллические решетки, хотя и не всегда трехмерные, в которых даже можно наблюдать дислокации [64].

Отметим, что нынешняя ситуация с суперрешетками напоминает ситуацию с обычными жидкими кристаллами, сложившуюся в середине 30-х годов, когда занятия ими считались проявлениями «физического снобизма», и только наиболее дальновидные исследователи угадывали уготованное им большое будущее, в том числе и в чисто техническом плане.

Ниже мы попытаемся подойти к описанию некоторых динамических свойств суперрешеток с позиций кинетической теории жидкостей и реальных кристаллов [65]. Для этих целей использовано представление о структонах. Понятие *структон* употреблялось Хаггинсом для описания способа организации любой структуры из составляющих ее элементов. Полезно отметить, что такого рода понятия носят, как правило, общий характер. В библиографии работ по общей теории систем, начиная с фон Барталанфи, можно найти множество такого рода определений: система — комплекс взаимодействующих элементов [66], система — совокупность элементов, находящихся в определенных соотношениях друг с другом и со средой и т. п. А вот под элементом понимают часто [67] предел членения системы с точки зрения решения конкретной задачи и (или) с точки зрения поставленной цели. При этом системы можно расчленять на элементы различными способами, в зависимости от формулировки цели и ее уточнения в процессе исследования. Характерно, что система может расчленяться не только на элементы, но и на различнейшие подсистемы. Термин *подсистема* [67] подчеркивает, что такая часть должна обладать некоторым свойством целостности, характерным для системы. Этим подсистема отличается от простой группы элементов, для которой не сформулирована подцель и не выполняется свойство целостности. В этом плане представляется по меньшей мере удобным [63] перевод подобных общесистемных представлений к описанию реального тела. При этом структура тела описывается как последовательность структонов разного размера или разного порядка (структон — это, несомненно, подсистема). Например, молекула представляет собой структурон «первого порядка» — способ организации атомов (структонов «нулевого порядка») в новую структуру. В молекулярных кристаллах элементарная ячейка представляет собой структурон «второго порядка», а решетка в целом — структурон — «третьего порядка». Однако в системах типа парафи-

новых кристаллов структоном третьего порядка следует считать «большую ячейку, а решетку в целом — структоном четвертого порядка. Выбор «порядка» определяется конкретными свойствами исследуемой системы или процесса. Например, при описании простых молекулярных кристаллов молекулы можно считать просто бесструктурными узлами решетки, так как при плавлении с ними ничего не происходит, а структоном первого порядка — элементарную ячейку. В случае же сложных кристаллов парафинового типа структоном первого порядка считаем те же участки молекул, которые образуют малую ячейку. Сами же молекулы при таком подходе уже структурами не являются, хотя и определяют размер большой ячейки.

Применительно к суперрешеткам под структурами надо понимать сергегированные блоки, образующие узлы; их можно трактовать как «супермолекулы» с некоторыми скрытыми параметрами. Тогда, следуя логике, изложенной в работе [65], можно трактовать супер-

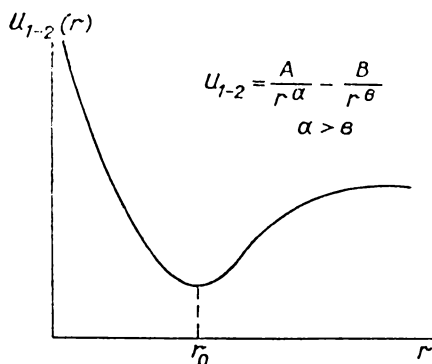


Рис. 22. Потенциал парного взаимодействия между узлами суперрешетки.

решетка представляет собой как бы «материализацию» внутреннего поля кристалла. Между узлами действуют силы как притяжения, так и отталкивания, причем силы эти сводятся к привычным каучукоподобным, так что релаксационной моделью

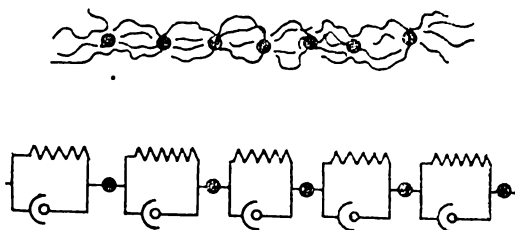


Рис. 21. Релаксационная модель линейной цепочки структонов.

решетки по аналогии с обычными молекулярными кристаллами вблизи абсолютного нуля (тепловое движение суперрешетки как целого практически отсутствует, тогда как внутри ее компонентов — узлов и «матрицы» — оно существует; с ним и связаны «скрытые параметры»). Идея этого подхода понятна из рис. 21—23. Выберем в кубической решетке (рис. 20) некоторую линию, проходящую через центры шаров, и рассмотрим ситуацию в линейном приближении так, как это делается в [65]. Матри-

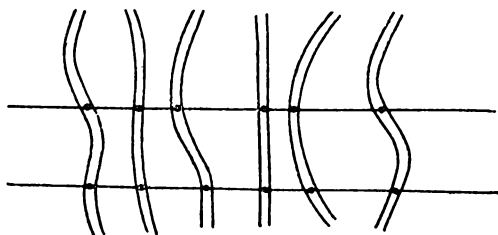


Рис. 23. Деформируемость структонов суперрешетки.

линейной цепочки структонов будет простая комбинация пружин и демпферов (рис. 21). Как показал Келлер, цепи матрицы слегка растянуты по сравнению с невозмущенным состоянием, что оправдывает пружинную модель. Что же касается вязких элементов модели, то смещение структонов связано с преодолением также вязкого сопротивления матрицы. Соответственно потенциал парного взаимодействия можно записать в форме конкуренции притяжения и отталкивания:

$$u(r) = \frac{A}{r^a} - \frac{8}{r^b}; \quad a > b, \quad (5.3)$$

чему соответствует похожая на привычные потенциальная функция (рис. 22). Разумеется, значения констант в этой функции определяются конкретным химическим строением блок-сополимера, что уже само по себе открывает интересные возможности. Сегодня наиболее изучены суперрешетки типа *AB* или *ABA* (где *A* — полистирол). Мы не будем рассматривать весьма необычные механические свойства суперрешеток, оправдывающие определение структонов как «супермолекул» со скрытыми параметрами. Упомянем лишь, что при растяжении вдоль осей цилиндров (или в направлении плоскостей пластинок, в системах *ABA*) полистирольные структоны проявляют деформационно-прочностные свойства, сопоставимые со свойствами супернематической фазы сверхвысокомолекулярного полистирола.

При рассмотрении колебательного спектра линейной цепочки структонов можно прийти к выражению для среднелогарифмической частоты:

$$2n\bar{\nu} = \sqrt{2f/m}, \quad (5.4)$$

в которое входят только задаваемые при синтезе параметры (коэффициент упругой силы $f = (\partial^2 u / \partial r^2)_{r=r_0}$ и масса структона m). Подставляя макроскопические значения f и масс, соответствующих наблюдаемым размерам структонов (десятки или сотни ангстрем), можно убедиться, что частота ν расположена где-то около условной границы ультразвукового и гиперзвукового диапазонов. Это делает (пока) не слишком удобными опыты типа резонансного возбуждения суперрешеток, но не мешает их исследованию методами вынужденных колебаний.

Внутренние параметры обусловлены деформируемостью структонов. Особенно отчетливо это видно при переходе к двумерным или одномерным решеткам: «потерянные мерности» при этом и проявляются как открытые параметры. Выбирая элементы цилиндров или пластинок, идентичные по размерам шарам в линейной модели, мы должны считаться с собственными изгибными колебаниями стержней или пластинок (рис. 23).

Из достаточно хорошо понимаемых в настоящее время свойств суперрешеток наиболее интересны термодинамические, заключающиеся в огромной стабильности суперрешетки как целого в ста-

тистических условиях даже выше температур размягчения компонентов или при набухании в селективных растворителях (это типичный случай, когда суперрешетка представляет собой действительно «систему», свойства которой отнюдь не являются суммой свойств входящих в нее подсистем). Если в обычных молекулярных кристаллах довольно бессмысленно рассматривать механизм «плавления», связанный с диссоциацией узлов решетки на составляющие частицы (хотя такой механизм и возможен), то в случае суперрешеток с такой возможностью следует считаться. Наряду с «обычным» плавлением, которое, как уже указывалось, довольно трудно достижимо и связано просто с разупорядочиванием суперрешетки, возможно плавление, обусловленное прекращением сегрегации, т. е. растворением структонов в матрице.

Оба вида плавления удобно наблюдать в набухших системах; в потенциал взаимодействий надо включить термы осмотической природы [61]. В этих условиях с определенными оговорками суперрешетки можно относить к жиддокристаллическим системам, ибо появляется осязательная текучесть. Ее можно зарегистрировать и чисто реологическими методами: по появлению предела текучести в растворе или расплаве блок-сополимера (рис. 24).

Возникновение этого предела можно трактовать как начальную стадию образования суперрешетки. Исследования такого рода по ряду причин удобно вести методом малоуглового рассеяния нейтронов [61]. Кинетические эксперименты с использованием дейтериевого контрастирования показывают, что восстановление суперрешетки из изотропного расплава происходит необычно быстро (верхний предел составляет около минуты). Вернемся к формуле (5.4). Использование аналогии с простыми кристаллами, на основании которой она выводится, требует еще доказательств или уточнений в связи с возможным размытием уровней по мере увеличения m , но по совершенно иным соображениям должен существовать аналог этой формулы, в которой f и m обязательно должны входить в степени $1/2$, т. е. $\bar{v} = F[(f/m)^{1/2}]$ (это следует уже из теории размерностей).

Следовательно, динамические свойства суперрешеток можно задавать уже на стадии химического синтеза, а при необходимости их модифицировать, например вулканизацией структонов, в результате которой они станут недеформируемыми и неразрушаемыми. Видимо, с этими возможностями и надо связывать дальние прогнозы использования суперрешеток.

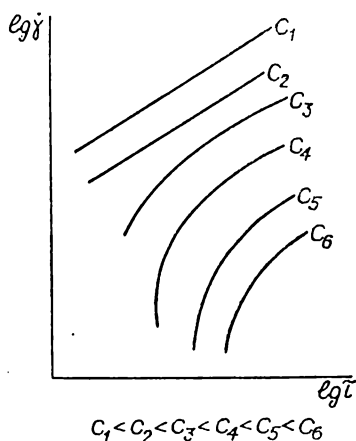


Рис. 24. Появление предела текучести в растворе блок-сополимера.

5.3. Получение высокопрочных полимеров

Исследователей, работающих в области полимерной технологии, издавна интересуют вопросы создания высокопрочных и высококомодульных материалов. Проблема линейной прочности полимеров сводится обычно к повышению прочности на разрыв в одном направлении. В случае же плоских пленок прочность на разрыв, хотя и важна, но играет подчиненную роль, а основное значение

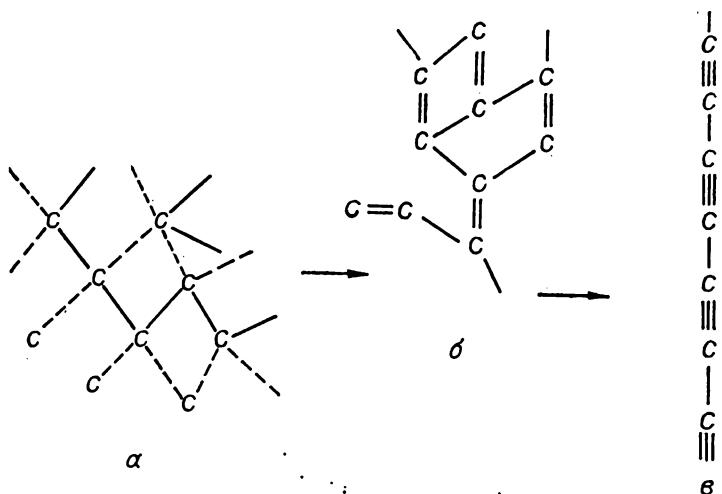


Рис. 25. Формы углерода:
а — алмаз; б — графит; в — карбин.

имеет сопротивляемость изгибу, закручиванию и т. д. При этом существенно, чтобы не было фабриллизации при кручении. Для объемных же изделий необходимо обеспечить высокие значения упругого модуля на сдвиг, изгиб, кручение, в зависимости от того, для чего изделие предназначено.

Рассмотрим основные принципы формирования высокопрочных структур, полимеров, используя в качестве модели углерод, входящий в состав большинства органических полимеров (рис. 25). Самое прочное вещество — алмаз — является ковалентным кристаллом и его структура представляет собой пространственную сетку одинаковых ковалентных связей. Когда хотят получить объемное высокопрочное высококомодульное соединение, то в большей или меньшей степени подражают структуре алмаза, т. е. пытаются создать правильную сплошную ковалентную сетку. Интересно, что чрезмерно правильной эта сетка не должна быть, в ней необходимы участки сброса напряжений, возникающих из-за теплового движения. Вспомним, что термодинамическое равновесие при увеличении размеров идеального кристалла требует приложения все больших давлений [65]. Слишком большие алмазы неустойчивы и самопроизвольно распадаются в пыль при длительном хранении.

Идеальная модель для не очень гибкой, но зато высокопрочной плоской пленки (второй вариант углерода) — графит, имеющий два специальных направления, в которых обеспечивается высокая прочность, а в третьем направлении, перпендикулярном первым двум, работают в основном межмолекулярные взаимодействия. Это заставляет оговорить одно существенное обстоятельство, на которое впервые обратил внимание Я. И. Френкель [65], когда обсуждал вопрос о конфликте внутренних и внешних сил. В нашем случае мы можем говорить о конфликте внутри- и межмолекулярных сил на примере графита, где этот конфликт достаточно хорошо виден. Как известно, графит образует чешуйка, потому что третье направление — это направление межмолекулярного взаимодействия, которое благодаря существованию плоской решетки менее стабильно. Для модельной пленки это хорошо, а для реальной нет, поскольку его необходимо как-то усиливать.

Третья форма углерода — карбин — представляет собой идеальную модель для волокна [84]. Здесь только в одном направлении сильное взаимодействие — в направлении чередующихся тройных и простых связей (рис. 25, а). Волокна с такой структурой могут иметь высокую прочность, но, по-видимому, они будут сильно фибриллизироваться. Поэтому для получения хорошего нефибриллизирующегося волокна желательно немного «испортить» структуру карбина структурой графита. Так и делают, получая высокопрочные переслаивающиеся волокна с высоким модулем, близким к теоретическому, структура которых представляет собой линейную кристаллическую решетку в чистом виде, лишь слегка подшитую.

Рассмотрим другой пример неорганического полимера — стеклянные волокна, обычно используемые в качестве арматуры или наполнителей. Эти наполнители увеличивают прочность различных полимеров, представляющих собой непрерывную пространственную матрицу, называемую обычно «связующим». Почему в стеклянном волокне, которое, казалось бы, не должно обладать каким-то преимущественным направлением, оно все-таки возникает, и почему достаточно тонкое стеклянное волокно ведет себя как полимерное. Технологи утверждают [4], что это обусловлено добавлением так называемых присадок и самим способом получения волокон, при котором в одном направлении формируется почти чистая линия ковалентных связей, в другом — решетка «портится» за счет натуральных свойств кварца или вносятся некие добавки, стимулирующие образование солевых связей. В любом случае в направлении, перпендикулярном линии ковалентных связей, действуют смешанные ионо-ковалентные силы, а они уже не столь прочны. Именно наличие одной основной линии связей и обеспечивает стеклянным волокнам свойства, делающие их механически неотличимыми от органических полимерных волокон. Подчеркнем, что те или другие объяснения этого эффекта нельзя принять полностью достаточными. Полимерное и стеклянное волокна выступают в данном случае в качестве подсистем, близких по функции к системе под названием материал. Возможно, что здесь,

как и во многих других случаях, на первый план выдвигается именно место подсистемы (элемента) в системе, а не его внутренние характеристики. По крайней мере описание с этой точки зрения дает, по-видимому, хорошие возможности для прогнозирования свойств материалов на стадии их разработки.

Как известно, дефицит прочности изделий из гибкоцепных полимеров, полученных по обычной технологии, т. е. содержащих складчатые кристаллы, обусловлен малым количеством проходных цепей, связывающих отдельные кристаллиты. В настоящее время разработаны технологические приемы, позволяющие путем различных обработок уже отвержденного изделия увеличить количество проходных цепей [63]. Как же различаются свойства такого волокна, содержащего очень много проходных цепей, но тем не менее состоящего из кристаллов со сложными цепями (рис. 26, а), по сравнению с волокном, полученным по методу ориентационной кристаллизации (см. 5.1) и содержащим пространственно-непрерывный каркас, образованный кристаллами на вытянутых цепях.

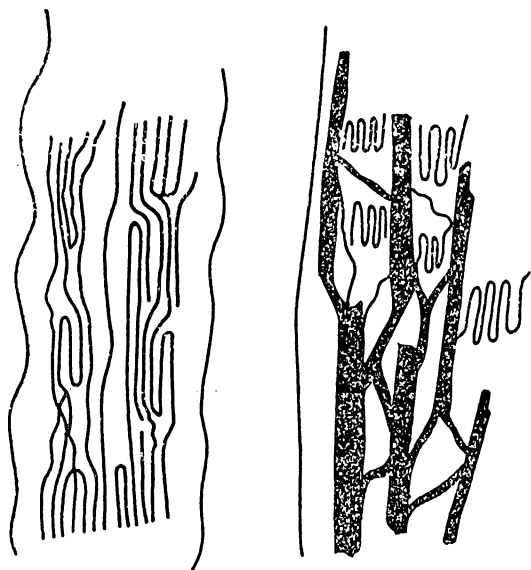


Рис. 26. Полимерные волокна:

а — содержащие проходные цепи и состоящие из кристаллов со сложными цепями; б — содержащие пространственно-непрерывный каркас, образованный кристаллами на вытянутых цепях.

тых цепях (рис. 26, б), который можно получить лишь в особых условиях формирования волокна из раствора (в расплаве)? Свежие волокна со структурами, изображенными на рис. 26, а, б, и по прочности, и по модулю могут быть одинаковы, однако есть чрезвычайно важное и для волокон, и для пленок явление — медленная релаксация, которая может продолжаться годами. Оказалось, что для пленок, обладающих каркасом из кристаллов с вытянутыми цепями (КВЦ) на прочность, и модуль за пять лет совершенно не изменились, а при наличии структуры со складчатыми кристаллами, даже при очень большом числе (до 90%) проходных цепей (а сейчас удается достичь и таких цифр), идет эта медленная релаксация, и высокие для свежесформированных изделий механические показатели с течением времени значительно понижаются. Эта медленная релаксация не всегда катастрофична, если речь идет, к примеру, об обвязочной ленте или сеновязальном шпагате, которые используют один сезон, а затем выбрасывают.

Но если речь идет о волокне для корда и не предполагается каждые три месяца заменять шипы, то естественно, что структура типа 5б предпочтительнее, чем структура типа 5а. Рис. 12 иллюстрирует энергетическую схему и принципиальный механизм процесса ориентационной кристаллизации. Если гибкоцепному полимеру, который в покое может существовать в двух формах — кристаллов со сложенными цепями или изотропного аморфного расплава (1 на рис. 12) — добавить энергию и перевести его на линию более высокой свободной энергии (линия A_2 на рис. 12), то возникает дополнительная область, обозначенная N (вынужденное нематическое состояние). Если же из этой области провести кристаллизацию, то уже получатся кристаллы с вытянутыми цепями, затем выделится теплота кристаллизации, свободная энергия системы понизится до пунктирной линии, которая характерна для кристаллов с выпрямленными цепями. Именно так получают высокопрочные полимеры, содержащие кристаллы с выпрямленными цепями. Стимулом к началу этой работы послужило появление суперволокна из жесткоцепных полимеров, которые, как известно, образуют в растворе (при достижении некоторой критической концентрации) термодинамически стабильную нематическую фазу, чем и объясняется способность таких систем спонтанно переходить в волокноподобное состояние [63]. Это явление положено в основу технологического процесса получения высокопрочных и высокомодульных волокон из жесткоцепных полимеров. Возникают нематические домены, обладающие уже достаточной конфигурационной информацией, но вместе с тем и высокой потенциальной избыточностью (см. главу 9). Эти домены и играют роль «заголовков» структуры будущего волокна — уже при малых фильерных вытяжках границы между доменами исчезают, и во всем объеме системы возникает одноосная параллельная упаковка макромолекул, фиксируемая удалением растворителя и кристаллизацией, происходящая только с характерным для жестких цепей распрямлением цепей.

Для расплавов гибкоцепных полимеров (их переработка в изделия ведется через расплав) термодинамически стабильной является изотропная фаза. Переход такой системы в ориентационно-упорядоченное состояние можно осуществить с помощью внешних ориентирующих воздействий, например одноосного растяжения расплава. На основе этого и был разработан метод ориентационной кристаллизации. Волокно, полученное по методу ориентационной кристаллизации и содержащее каркас, разрывается примерно при 1,2 ГПа и довольно больших удлинениях. Однако разрываясь, оно распадается на фибриллы, имеющие разрывную прочность до 4 ГПа и удлинение около 10%. При разрыве этих фибрилл происходит дальнейшая фибриллизация системы, в результате которой уже появляются некие хрупкие волоконца, напоминающие «усы» (т. е. линейные монокристаллы), слишком хрупкие, чтобы измерить их прочность. Но она, по-видимому, уже приближалась к теоретической (15...20 гПа).

Характерно, что принцип создания «особых» направлений может быть применен и для металлов. Известно, что с уменьшением толщины металлической пленки ее прочность и модуль резко растут, причем особенно интенсивно при толщине около 10^3 нм. При этом обычно считают, что «поверхность начинает доминировать над объемом». Термодинамический смысл этого превращения достаточно глубок и виден как раз на превращениях металлической проволоки в металлическое волокно. Пока проволока толстая, в направлении всех трех осей ее механические и термодинамические свойства одинаковы. Но когда она становится очень тонкой (при толщине порядка 10^3 нм), она превращается в малую подсистему(1) в перпендикулярных длине направлениях, благодаря чему направление длины становится особым. В этом направлении система ведет себя как нормальный (кристаллический) металл, а в перпендикулярных она как бы аморфизирована. По-видимому, такие превращения неполимеров в тела, ведущие себя подобно полимерам (и обратно), будут основой новой технологии, которая сейчас начала зарождаться как для полимеров, так и для неполимеров.

Для двухмерных систем, в отличие от линейных, по-видимому, необходимо создавать кристаллики необходимых размеров, из которых выходит множество проходных цепей в двух взаимно перпендикулярных направлениях. В этом случае может помочь биаксиальная вытяжка и т. п.

В случае пространственных систем нужно создать как можно большее число узлов и равномерно «выпустить» из них как можно больше проходных цепей. Сейчас эту проблему решают с помощью введения истинного каркаса из полимерных или неполимерных волокон, пронизывающих плоскую или пространственную систему. Однако существуют и другие решения данной проблемы. Так, авторы работы [77] предлагают активизировать поверхность неорганического наполнителя. Из него инициируется рост полимера, причем можно получить систему, в которой 90% наполнителя. В этом случае достигается огромная экономия полимера.

Весьма перспективно для этой цели использование блоксополимерных суперструктур [61] с кристаллизующимися структурообразующими, т. е. сегрегирующими блоками и разумным подбором матрицы (центрального блока в сополимере типа АБА).

Эта матрица должна выдерживать высокие температуры, потому что высокие прочности и модули нужны, как правило, для изделий, которые эксплуатируются при высоких температурах и должны при этом сохранять некоторый запас прочности. Из блоксополимеров можно получить различные упорядоченные суперструктуры, но во всех случаях кристаллические центры (ламели, цилиндры или сферы) соединены большим числом проходных цепей, расходящихся из центров во все стороны. Изделие должно обладать большой прочностью, а если правильно выбраны компоненты, то и термостойкостью. Если это блоксополимер, который образует структуру из параллельно упакованных цилиндров, то,

растягивая его в направлении оси цилиндра, можно получить те же прочности, что и на сверхмолекулярном полистироле.

Создание описанных выше систем позволит бесконечно варьировать их свойства. Например, на основе систем, содержащих в качестве структурных подсистем шарики, погруженные в матрицу, можно получить изделие с высокой динамической прочностью (до сих пор говорилось о статической прочности). Варьируя размеры и материал шариков и матрицы, можно в широком интервале изменять характеристическую частоту системы. Определение резонансных и нерезонансных частот позволит в самом общем виде решить проблему вибростойких материалов. Построив материал так, что в трех направлениях он будет иметь разные частоты и разные температуры Дебая и соответственно разные коэффициенты Грюнайзена [78], можно задавать любые формы механической анизотропии твердых тел.

САМООРГАНИЗАЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ

«В будущие годы, когда знание белков и коллоидов возрастает, будущие инженеры смогут взяться за конструирование роботов, подобных тому или иному млекопитающему не только по поведению, но и по структуре».

Н. Винер «Кибернетика»

Представляется необходимым уточнить значение термина *самоорганизация* и определить, о какой именно части коллоидных систем будет идти речь.

Как отмечал один из основоположников кибернетики Эшби [68], поскольку ни одну систему нельзя считать самоорганизующейся и поскольку выражение *самоорганизация* ведет к укоренению весьма путанного и противоречивого представления о данной проблеме, его, вероятно, вообще не следовало бы употреблять. Упоминая о коллоидных системах, можно отметить определение, приведенное в работе [69]: «Коллоиды — это... гетерогенные системы, содержащие вещества в высокодисперсном состоянии, а коллоидная химия — физическая химия дисперсных систем и поверхностных явлений». Вместе с тем понятия *высокодисперсные* и *поверхностные* совсем не самоочевидны. Является ли система с размером частиц 10^{-5} см высокодисперсной? А система с размером частиц 10^{-6} см? А система с размером частиц 10^{-3} см? На этот вопрос ответить очень трудно. Надо согласиться, что границы понятий очень расплывчаты. Таким образом, авторы берут на себя смелость свести воедино два неточных и достаточно неопределенных понятия и ввести третье комплексное, которое, наверное, не станет определеннее исходных двух. Для оправдания приведем цитату из работы выдающегося математика Заде [70]: «Элементами мышления человека являются не числа, а элементы некоторых нечетких множеств, или классов объектов, для которых переход от «принадлежности» и «непринадлежности» не скачкообразен, а непрерывен».

Для большей определенности можно сказать, что нами будут рассматриваться системы коллоидных частиц, состоящих из органических молекул (хотя многие из описываемых ниже закономерностей могут быть приложены и к неорганическим коллоидам).

В данном контексте под самоорганизацией понимаем самопроизвольное повышение структурной (геометрической) сложности

элементов и (или) систем. При этом не существенно, за счет чего происходит этот процесс — повышения или понижения свободной энергии системы.

Как известно, дисперсные системы могут быть как лиофильными, так и лиофобными. Для первых характерно сильное межмолекулярное взаимодействие вещества коллоидной фазы со средой, а для вторых — слабое. При том в лиофильных системах вокруг частиц дисперсной фазы образуются сольватные (гидратные) оболочки из молекул среды. В этом случае достаточно частое явление — самопроизвольное диспергирование. Считают [69], что возрастание свободной энергии при диспергировании лиофильных ПАВ, связанное с увеличением поверхности, компенсируется за счет уменьшения энтальпии в процессе сольватации частиц и роста энтропии системы в результате броуновского движения частиц. В случае же лиофобных коллоидов такой компенсации не происходит. Если исследовать предельные значения этих зависимостей, то получим нечто в виде графиков (рис. 27). При этом в районе точки *a* будут находиться отдельные молекулы, а в районе точки *b* — твердое тело.

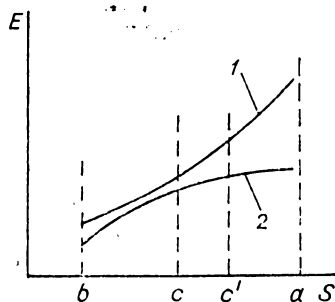


Рис. 27. Зависимость свободной поверхностной энергии от площади поверхности раздела фаз:

1 — гидрофобные; 2 — гидрофильные частицы дисперсной фазы.

Различие в поведении зависимостей 1 и 2, по мнению Ребиндера [71], достаточно четко разделяет коллоиды на лиофобные и лиофильные.

На самом деле все обстоит значительно сложнее. Кинетика образования коллоидов подчиняется большому количеству параметров воздействий. Например, поведение сольватированных оболочек подчиняется электрохимическим закономерностям, при участии в поверхностных слоях белковых молекул существенно изменяются их структурно-механические свойства — повышается прочность и т. д.

Отметим некоторые, не вызывающие сомнений свойства коллоидных систем:

все коллоидные системы состоят из элементов, обладающих определенной автономностью;

ряд свойств системы зависит только от структуры и концентрации, независимо от того, каким путем система пришла к данному состоянию;

исходя из индивидуальных свойств элементов, система преобразует некоторые особые качества, которыми не обладают отдельные элементы.

На основании этих свойств для описания коллоидных систем можно использовать общую теорию систем и кибернетику (в настоящее время идут дискуссии о том, какая из этих наук более

общая и включает в себя оставшуюся. Но предмет этой дискуссии выходит за рамки данной книги).

Возвращаясь к рис. 27, отметим некоторую условную область, существующую между точками s и s' . Дело в том, что в нем наличествуют устойчивые коллоидные системы, явившиеся исходным материалом для добиологической самоорганизации коллоидов, приведшей в конце концов к возникновению жизни. Опарин [72] отмечал, что наличие просто в растворе, на молекулярном уровне, белков или нуклеиновых кислот не может явиться исходным началом жизни. Такого рода началом может быть только их сочетание в фазовообособленных системах. Следовательно, рассмотрение вопросов возникновения дисперсной молекулярной фазы в растворе (фазовообособленных систем), ее структурной самоорганизации является важным для понимания сути возникновения жизни. Как отмечено в работе [73], обособление от окружающей среды обычно ведет к стабилизации изолированной системы, а система самоорганизующаяся, выделившись из однородной среды, начинает с ней активно взаимодействовать. Отметим, что коллоидные частицы не полностью изолированы от раствора, а напротив, активно с ним взаимодействуют — обмениваются молекулами, сольватируются и т. п., т. е. соответствуют понятию самоорганизующейся системы.

В настоящее время в работах многих ученых и в первую очередь школы Пригожина установлены отличия термодинамики замкнутых и открытых систем. Если в первых стационарность наступает при минимуме энергии элементов, то в последних — в случае, когда количество вводимых в систему энергии, массы равно их количеству, выводимому из системы.

Вопросы энергии, энтропии, их динамики в развивающихся системах очень противоречивы. Во многом очевидные представления не отвечают внутренним энергетическим закономерностям систем (и, в частности, коллоидных систем). Поэтому ниже мы попытаемся разобраться в этом.

6.1. Негэнтропия, вероятность и молекулярные информационные машины

Взаимосвязь между энтропией и информацией, обусловленная сходством применяемых для их определения выражений, длительное время интересует многих ученых. Известный физик Бриллюэн [74] приводит классификацию Кельвина для типов энергии. Он отмечает, что принцип Карно постулирует деградацию энергии от энергии высокого качества (механической, электрической) к энергии среднего качества (химической) и, наконец, к энергии низкого качества (тепловой). Бриллюэн ввел термин *негэнтропия* для описания качества энергии. Согласно [74], система обладает негэнтропией, если она обнаруживает возможность совершения рабо-

ты за счет механической, электрической или хотя бы химической энергии. Негэнтропия существует в системе и тогда, когда последняя состоит из некоторых элементов, обладающих различной температурой (тепловой энергией), давлением, электрическим потенциалом и т. п. Шредингер [75] считал наличие негэнтропии в пище, которую организм получает для компенсации затрат на совершенную работу, одним из главных условий его существования. Наверное, не совсем корректно говорить, что «организм потребляет негэнтропию с пищей». Более точным представляется следующее определение: организм выделяет из потребляемой пищи заложенную в ней химическую энергию (энергию среднего качества, характеризующую более высокой негэнтропией, чем тепловая энергия) за счет комплекса химических реакций, происходящих при ее переработке.

По известной формуле Планка—Больцмана энтропия системы связывается с термодинамической вероятностью существования системы:

$$S = k \ln w, \quad (6.1)$$

где k — постоянная Больцмана; w — статистический вес (вероятность) состояния. Возникающую негэнтропию определяют как отклонение системы от состояния с S_0 :

$$\Delta N = (S_0 - S). \quad (6.2)$$

Известно, что понятие энтропии тесно связано со вторым законом термодинамики, который в одной из редакций имеет следующий вид: «в изолированной системе энтропия только увеличивается». Некоторые противоречия между вторым законом термодинамики и кинетическим подходом, особенно в случае диффузионных потоков в системе, отмечались в ряде работ. Так, известный физик Чандрасекар в 1943 г. отмечал [76], что второй закон термодинамики верен только для тех диффузионных процессов, в которых наблюдающееся выравнивание молекулярных концентраций по своему значению заметно превосходит значение корня квадратного из среднего квадрата относительной флуктуации.

Ниже мы приведем два умышленных эксперимента по определению негэнтропии поверхностной пленки липидов в процессе ее образования.

Представим себе систему, состоящую из растворителя (воды) и молекул липида. Соотношение количеств молекул липида и воды в единице объема системы

$$n_l/n_b \ll 1. \quad (6.3)$$

Чему равна вероятность того, что рядом будет находиться n молекул липида? На первый взгляд, это очень простой вопрос. Мы привыкли свободно оперировать понятием вероятность, часто не задумываясь над тем, насколько его употребление правомерно. Во-первых, отметим, что понятие *вероятность* подразумевает предварительное исследование системы. Действительно, чтобы сказать,

что событие α совершится в системе θ с вероятностью P_α , а событие β — с вероятностью P_β , надо вначале провести серию экспериментов с такой системой и определить эти вероятности. Можно возразить, что в термодинамических системах вероятности состояний соответствуют энергии этих состояний, например, по выражению

$$P_\alpha = l^{-\frac{u_\alpha}{kT}} / \sum_1^m l^{-\frac{u_i}{kT}}, \quad (6.4)$$

где u_α — энергия (свободная) системы в состоянии α ; u_i — энергия i -го состояния системы.

Однако из (6.4) очевидно, что для определения P_α необходимо предварительное определение энергии частиц во всех состояниях! То есть опять-таки детальное предварительное изучение системы. А как быть с более сложными, чем идеальный газ, структурами, например с коллоидами, в которых многочисленные факторы оказывают влияние на энергию системы?

Продолжим мысленный эксперимент с возникновением поверхностного слоя липида. Для этого предположим, что вероятность данного состояния системы определяет некоторый наблюдатель (например, пресловутый «демон»), не имеющий априорной детальной информации о вероятности или энергии тех или иных состояний системы. Естественно, что он будет вычислять вероятность, исходя из обычных геометрических соображений. Тогда с учетом (6.3) вероятность того, что рядом будут находиться две молекулы липида, будет

$$P = (n_1/n_b)^2. \quad (6.5)$$

А вероятность того, что рядом будут находиться m молекул липида, в первом приближении

$$P_m = (n_1/n_b)^m. \quad (6.5a)$$

Подставив (6.5a) и (6.1), получим

$$S_c = mk \ln \frac{n_a}{n_b}, \quad (6.6)$$

где S_c — некоторая «геометрическая» («структурная») энтропия коллоидной системы в состоянии, когда m молекул организовали структуру слоя.

Если рассчитать изменение негэнтропии системы при образовании липидного слоя, то из (6.5), (6.6) и (6.2) с учетом того, что $m \gg 1$, получим

$$\Delta N \simeq km \ln \frac{n_a}{n_b}. \quad (6.7)$$

Из (6.7) можно заключить, что при образовании слоя липидов в системе дополнительно возникает некоторая негэнтропия. Осно-

ываясь на этом, в литературе довольно часто утверждают, что усложнение молекулярных структур в процессе возникновения жизни на всех этапах сопровождается увеличением негэнтропии систем. Поэтому появление таких систем маловероятно.

Второй эксперимент проведем традиционным способом нахождения вероятности системы из уравнений типа (6.4).

В этом случае энтропия («термодинамическая») системы в состоянии возникшего липидного слоя будет определяться по (6.4).

Условно считая, что в коллоидных системах существуют четыре состояния:

молекула липида находится в окружении молекул воды (энергия u_1);

молекулы липида соединены в некоторый агрегат из двух—пяти молекул (энергия u_2);

молекулы липида соединены в агрегат из двух—пяти молекул, но находятся на поверхности жидкости, причем углеводородные «хвосты» выходят из воды (энергия u_3);

молекулы липида расположены сплошным мономолекулярным слоем на поверхности воды, причем углеводородные «хвосты» выходят из жидкости (энергия u_4).

Исходя из многочисленных предварительно проведенных экспериментов, известно, что свободная энергия в упомянутых выше состояниях уменьшается по мере перехода из состояния одиночной молекулы к состоянию ориентированного поверхностного слоя, т. е.

$$u_1 > u_4. \quad (6.8)$$

Переход от состояния одиночной липидной молекулы в окружении молекул воды к состоянию поверхностного слоя сопровождается уменьшением негэнтропии, так как S_4 будет больше S_1 :

$$S_1 - S_4 = -\Delta N. \quad (6.9)$$

Здесь наблюдается картина, обратная картине, возникающей в первом мысленном эксперименте. В результате образования слоя липидов увеличивается «термодинамическая» энтропия системы. Остается еще открытым вопрос о соотношении энергий промежуточных состояний. Что же энергетически выгоднее молекулам липида — организовать некоторую структуру внутри жидкости или слой молекул на ее поверхности? Как известно из опытов Ленгмюра и его последователей, в молекулах ПАВ, организованных по принципу полярная головка + неполярный углеводородный «хвост», головка имеет большое сродство к воде, а «хвост» гидрофобен. И, соответственно, наиболее выгодное энергетически состояние — поверхностное. Разнообразные агрегатные образования молекул в растворе описаны и Ребиндером [71], обращающим внимание на исследование, в котором обнаружены отдельные «льдоподобные» квазикристаллические структуры углеводов молекул в толще воды. Эти образования имеют энергию большую, чем энергия поверхностного слоя молекул.

Исходя из этого, (6.8) примет вид

$$u_1 > u_2 > u_3 > u_4, \quad (6.8a)$$

а следовательно, весь переход от одиночных молекул к поверхностному слою происходит с увеличением энтропии и уменьшением свободной энергии системы.

Поскольку второй мысленный эксперимент основан на большом наборе экспериментальных данных, то естественным представляется считать его верным.

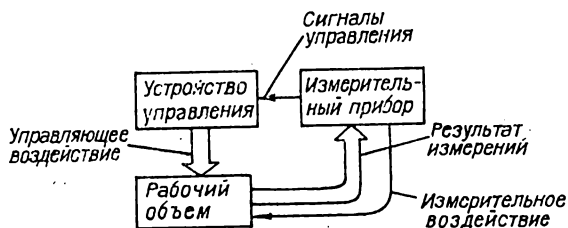


Рис. 28. Обобщенная структурная схема «молекулярной информационной машины».

Существует достаточное количество вариантов возникновения органических молекул (протеинов, липидов и др.), являющихся химической основой жизни. При этом, как показано выше, есть значительная термодинамическая вероятность их скопления в виде поверхностных слоев в некотором первичном растворе. Достаточно распространенное мнение о том, что возникновение жизни на всех этапах является процессом, направленным против накопления энтропии («термодинамической»), по-видимому, недостаточно аргументировано, по крайней мере при рассмотрении в рамках парадигмы равновесной термодинамики.

Выше мы отбросили как неверный первый мысленный эксперимент и стали основываться на результате второго, отличающегося большим количеством предварительно проведенных экспериментов. А как быть в случае, если мы видим исследуемую систему впервые, и у нас нет ни одного результата, характеризующего вероятности того или иного состояния?

Такой эксперимент ставится в известных «молекулярных информационных машинах»: Демерса, Джекобсона, Силарда, Габора. На рис. 28 представлена обобщенная структурная схема такого рода «информационной машины». Подробного описания машин мы проводить не будем. Интересующихся можно отослать к прекрасному обзору таких устройств в работе [74]. Отметим только, что все они работают по такому циклу: измерительный прибор оказывает некоторое воздействие на рабочий объем (например, освещение), содержащий некоторое количество молекул газа. Измерительный прибор измеряет состояние вещества в рабочем объеме и выдает сигнал устройству управления, которое управляет регулирующими узлами, расположенными в рабочем объеме (рис. 28).

В общем это типичное описание традиционной системы автоматического регулирования (исключая тот факт, что в качестве устройства управления выступает... «демон»). Следует отметить, что в подобных машинах впервые (начиная с 1929 г.!) были использованы принципы, положенные в основу кибернетики: намечены два контура регулирования, контур измерений и контур силового управления («демон») и характеристики (предельные) таких устройств. Показано, что в самом оптимальном случае систем

Рис. 29. Кажущийся алгоритм работы «информационной машины».

Интересно, что работы по «информационным молекулярным машинам» появились практически в то же время, когда были выполнены основополагающие труды Тьюринга по алгоритмическим машинам, положившие начало теории алгоритмов. Однако, к сожалению, они не были использованы Силардом и Габором.

производится регулирование, больше допустимого предела γ_1 или меньше γ_2 , включаются соответствующие регуляторы и вновь производится цикл измерения. Почему этот алгоритм кажущийся? Если корректно говорить об информации и энтропии системы, то необходимо безжалостно вскрыть все принимаемое по умолчанию в данном алгоритме. Приведем сокращенный список отсутствующих в алгоритме (рис. 29) существенных пунктов:

откуда известно, как воздействовать на рабочий объем (освещать видимым светом, тепловыми нейтронами, механически растягивать и т. д.)?

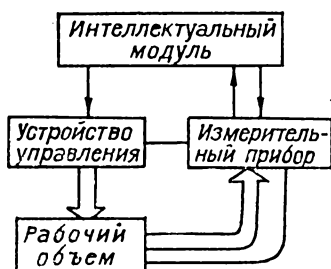


Рис. 30. Истинная структурная схема «информационной машины».

откуда известна энергия каждого конкретного состояния системы?

каковы зависимости параметров от воздействующих факторов?

какие пределы регулирования?

являются ли свойства системы обратимыми?

если часть свойств необратима, то как учитывается структурная «память» системы? и т. п.

Очень многие аспекты этих вопросов учтены при проектировании современных автоматических систем химического производства. Но, к сожалению, общим недостатком таких устройств являются (как и в случае описанной выше системы) наперед заданные жесткие модели кинетики протекающих процессов.

Исходя из желания показать явно все недостающие части «информационной машины» и ее алгоритм, можно привести структурную схему машины (рис. 30). Как видим, к схеме, показанной на рис. 28, добавился один блок — «интеллектуальный модуль», роль которого неявно играл «демон». При этом алгоритм работы такой схемы будет иметь самый упрощенный вид (рис. 31). Здесь из традиционных схем «информационных машин» выпало существенное, очень сложное звено, практически не поддающееся описанию на уровне динамики энтропии в системе. Отметим, что «интеллектуальный модуль» общий как для систем, в которых большая часть его функций выполняется человеком, так и для полностью автоматизированных, например на базе современных ЭВМ. Он относится к группе алгоритмов искусственного интеллекта [79].

В случае «информационных машин» информацией (в шенноновом понимании) будет некоторое сообщение о состоянии рабочего объема, приводящее к уменьшению неопределенности в описании рабочего объема на основе предварительно проведенных исследований.

В соответствии с шенноновым описанием информационных закономерностей в каналах связи [80] телеграфист для расшифровки телеграфного сообщения, принятого на отдаленном телеграф-

ном пункте, должен получить вначале пакет с описанием шифра и метод расшифровки. Чтобы оценить количество информации (по Шеннону) в принятом сообщении, вначале надо послать гонца в ближайший университет, где произведут предварительный статистический анализ языка сообщения и кода.

Эти рассуждения мы привели специально для иллюстрации рамок использования широко применяемого понятия *информация*.

Информация (в шенноновом смысле) — сообщение, снимающее

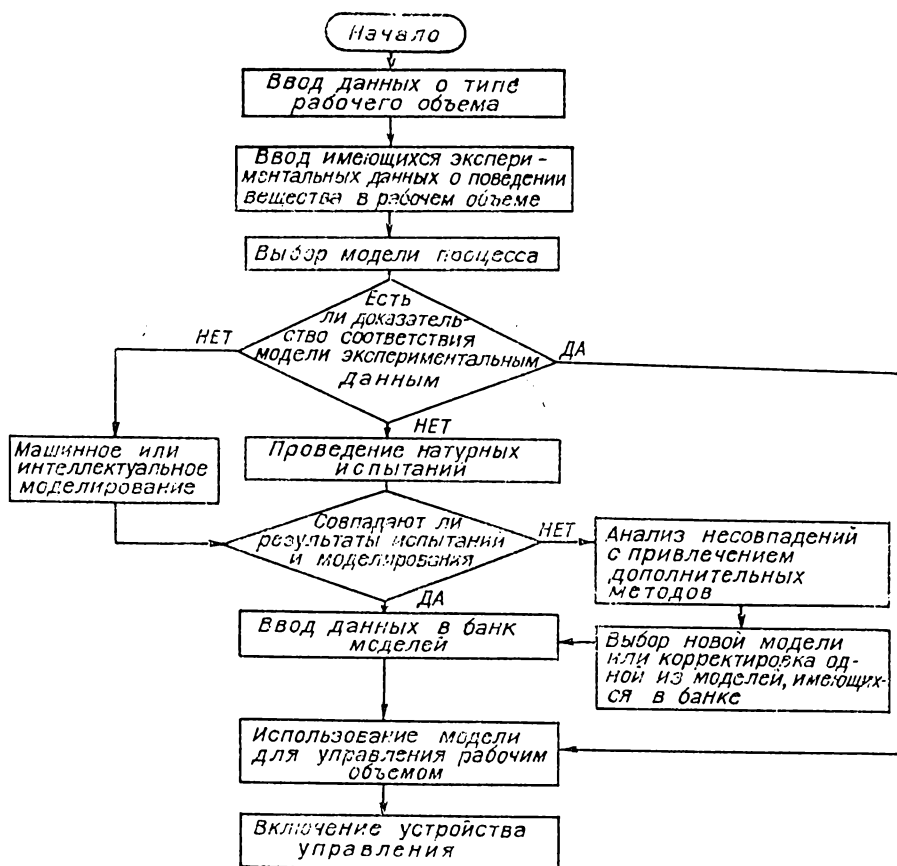


Рис. 31. Один из вариантов действительного алгоритма «информационной машины».

неопределенность в описании какой-либо системы на основании предварительного изучения вероятности ее пребывания в том или ином состоянии. При этом мерой вероятности состояния системы служит энтропия. В таком определении термодинамическая энтропия выступает как частный случай энтропии, отличаясь лишь тем, что вероятность состояний системы зависит от энергии этих состояний.

Приведенные выше описания «информационных молекулярных машин» и их алгоритмов позволяют нам более корректно говорить о динамике информации внутри системы. Известно, что обмен информацией внутри системы — один из важнейших признаков системы самоорганизующейся. Однако будет ли между частями молекулярной, в частности коллоидной, системы идти обмен информацией в шенновом смысле? Вряд ли. Ведь коллоидная частица не накапливает предварительно в своей памяти информации о ве-

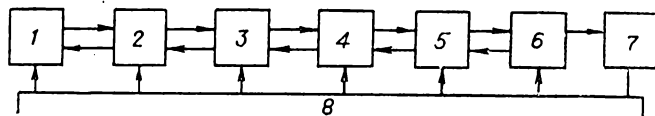


Рис. 32. Цепь автоматов фазовых состояний коллоидной системы:

1 — молекулярный раствор; 2 — агрегаты; 3 — сетка; 4 — коацерват; 5 — флоккулят; 6 — обратимый гель (осадок).

роятностях своих прошлых и будущих состояний.

Предложим модель описания обмена сообщениями между различными фазовыми состояниями коллоидной системы на основе теории автоматов. В главе 2 мы описывали элементы теории конечных автоматов Мили, Мура, приводили схемы цепей автоматов Неймана. В соответствии с таким подходом представим коллоидную систему в виде цепи (последовательности) автоматов, работающих по типу автоматов Неймана, но имеющих, в отличие от последних, не два входа, а три и обладающих несколько отличным алгоритмом. В предложенной цепи автоматов состояние каждого автомата зависит от его состояния в предыдущий момент времени (шаг), сигналов на его входах — «левом», «правом» и «нижнем», поступающих в настоящий момент времени. Исходя из этого, представим кортеж фазовых превращений, происходящих в растворе высокомолекулярного соединения, в виде автоматной цепи (рис. 32). Представленные в цепи автоматы характеризуются тем, что их следующее состояние зависит от «команды», включающей три входных сообщения q_i , q_j , q_k и настоящее состояние автомата q_m . Заметим, что у Неймана [15] состояние автомата в следующий момент времени (шаг) зависит от двух входных сообщений и состояния автомата в настоящий момент времени r_i , r_j , r_m . Так называемая нейманова команда, обеспечивающая переход автомата из состояния m в состояние n , определяется выражением

$$r_i r_j r_m \rightarrow r_n. \quad (6.10)$$

В нашем случае команда, обеспечивающая переход от состояния m к состоянию n ,

$$q_i q_j q_k q_m \rightarrow q_n. \quad (6.11)$$

Но это еще не все отличия. Для адекватного описания коллоидной системы автоматное описание должно учитывать следующие условия:

система в одном из фазовых состояний может получить сообщение слева или справа (в пространстве параметра, по которому происходит трансформация состояний). Одновременное получение сообщений с обеих сторон невозможно, поскольку коллоидная система не может, например, находиться одновременно в состоянии агрегатов и коацерватов, минуя состояние сетки. (На самом деле в растворе достаточного объема, по-видимому, могут сосуществовать и различные состояния одновременно. Но в этом случае рас-

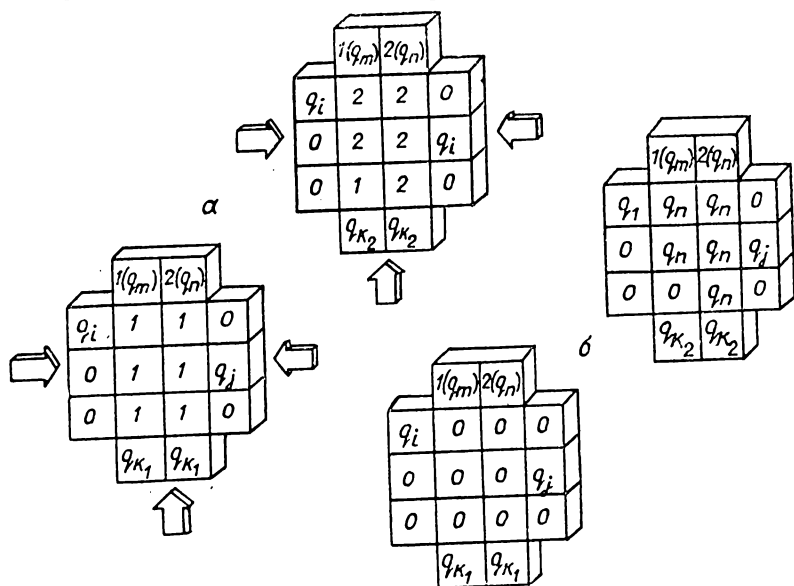


Рис. 33. Таблицы состояний (а) и выходов (б) автомата фазового состояния коллоидной системы.

твор можно представить как систему, состоящую из подсистем, каждая из которых удовлетворяет предложенной автоматной схеме);

система переходит в очередное состояние только из состояния соседнего с ней;

сигнал q_k является общим для всех автоматов (параметр или сообщение среды).

Исходя из этого четверки параметров автоматных команд для описания коллоидов могут быть только следующими:

$$\begin{aligned} q_i 0 q_k q_m &\rightarrow q_{n1}; \\ q_j 0 q_k q_m &\rightarrow q_{n2}; \\ 0 0 q_k q_m &\rightarrow q_m. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Отметим, что q_k определяется, например, соотношением C_v, C_m , где C_v — концентрация молекул воды в единице объема, C_m — концентрация макромолекул в единице объема.

На рис. 33 представлены таблицы состояний (а) и выходов (б) предложенного автомата. Вверху таблиц обозначены состояния

автомата, слева — входы со стороны левого автомата (или просто слева), справа — входы справа, снизу — входы со стороны среды (или снизу). Напомним, что автоматное описание любой системы предполагает учет как пространственного, так и временного состояния системы. Автомат имеет всего два состояния «1» и «2», которым отвечают выходным сигналы автомата «0» и « Q_n ». При чем «2(q_n)» — состояние автомата, соответствующее одному из семи состояний коллоидной системы.

Возникает вопрос, какими же сообщениями обмениваются автоматы состояний между собой? Очевидно, что это не шеннонова информация. Эти сообщения зависят только от состояния системы в данный момент времени. В качестве примера исследования именно такого рода внутренних сообщений, связывающих различные состояния системы, можно привести результаты работы [81], в которой показаны информационные закономерности формирования кристаллической структуры. Тогда сообщения — далекодействующие электрические силы активных элементов поверхности кристалла. Возможно, что в случае коллоидов информационные сообщения несут силы лондоновы, кулоновские, водородных взаимодействий или др.

Описание на уровне цепи автоматов соответствует *структурной* характеристике коллоидных систем. Ее соотношение со свободной энергией нас в данном случае не интересует. Нельзя однозначно сказать, что при движении коллоидной системы в фазовом пространстве с координатой q_n она плавно изменяет свою свободную энергию. Даже если это и так для некоторых вариантов коллоидных систем, то несомненно найдется такая координата в фазовом пространстве параметров системы, движение по которой не имеет однозначной зависимости от энергии, а вместе с тем позволяет системе проходить какой-то набор структурных состояний. Отметим, что в последних рассуждениях мы не пользовались понятием *вероятность*. Здесь, по-видимому, можно использовать понятие *структурная сложность* системы. Представления об использовании понятия *сложность* для описания информационных характеристик систем были уже развиты ранее Колмогоровым [11], однако все это требует дальнейшего уточнения.

6.2. Коацерваты, морфогенез

Выше описана цепь последовательных фазовых превращений в растворе высокомолекулярного соединения. В случае раствора низкомолекулярных коллоидов фазовые превращения также идут от золя к гелю через ряд промежуточных стадий. Образование мицелл является процессом, происходящим в борьбе двух противоположно направленных сил: кулоновских сил отталкивания между ионогенными группами и лондоновых сил притяжения длинных углеводородных радикалов. С ростом длины углеводородной части [82] преобладают силы притяжения, которые, однако, не растут

слишком сильно, так как им противодействует энергия электростатического отталкивания. Серебровская [82] отмечает, что наименьшая критическая концентрация мицеллообразования (ККМ) у солей жирных кислот с числом углеводородных атомов от C_{14} до C_{20} и это приводит к тому, что у данной группы мыл наибольшая энергия ассоциации, приводящая к образованию мицелл. При этом величина мицеллярных масс достигает значений вплоть до миллиона. Кроме того, мыла таких кислот только с четным числом

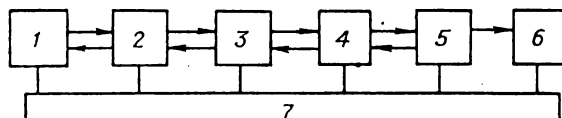


Рис. 34. Цепь автоматов фазовых состояний коллоидных систем [82]:

1 — сферические мицеллы; 2 — сандвичевые мицеллы; 3 — плоские мицеллы; 4 — сетка плоских мицелл; 5 — смектик; 6 — коагель.

углеродных атомов обладают водоудерживающими свойствами. Предполагают [82], что из-за этого жирные кислоты такого состава наиболее распространены у живых организмов и являются одной из основных составляющих мембран клетки.

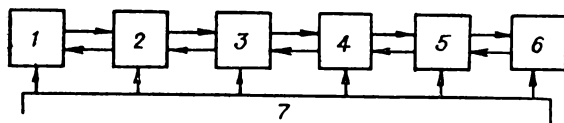


Рис. 35. Цепь автоматов фазовых состояний коллоидной системы по [83]:

1 — молекулярный раствор; 2 — золь; 3 — эластично-вязкая система; 4 — коацерват; 5 — смектик; 6 — коагель.

Самоорганизация коллоидов выше ККМ идет следующим путем [82] (мы представим этот процесс в виде цепи автоматов) (рис. 34).

По Бунгенбергу де Йонгу и Бойи [83], которые являются одними из самых известных исследователей коацерватов, переходы в растворе происходят по схеме, представленной на рис. 35.

Почему же такое внимание уделяется коацерватному строению коллоидной системы? Напомним, что явление коацервации заключается в выделении из однородного коллоидного раствора слоя или капель, связанных с переходом от полного смешения к ограниченной растворимости. Главное условие коацервации — понижение растворимости веществ, составляющих систему. При этом в растворе возникают две фазы. Одна из них, содержащая основное количество вещества — *коацерват*, а другая, обедненная веществом фаза — *равновесная жидкость* [82]. На растворимость влияют такие факторы: температура, рН, ионная сила, концентрация раствора, число реакционных групп на молекулу и т. д. (отметим,

что это все координаты, по которым может происходить развитие цепей автоматов, моделирующих коллоидную систему).

Согласно [82], существует два типа коацерватов: обратимые, исчезающие при увеличении концентрации воды, и с ограниченной обратимостью, когда увеличение концентрации воды не приводит к исходной конформации молекул (например, белка). По мнению Опарина [9], коацерватная фаза коллоидной системы является особенно подходящей для образования первичных био-

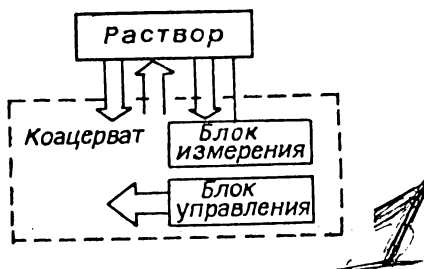


Рис. 36. Вариант структурной схемы системы обмена вещества и энергии в коацерватах.

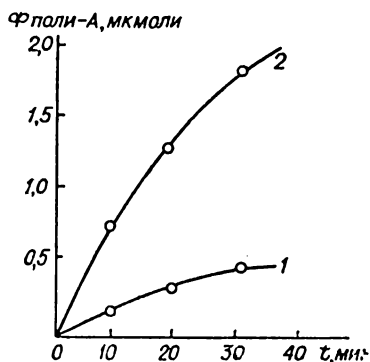
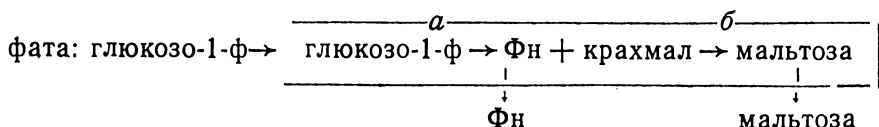


Рис. 37. Зависимость синтеза полиадениновой кислоты в коацерватных каплях системы гистон-гексокиназа-полинуклеотидфосфорилаза (1) и системы гистон-полинуклеотидфосфорилаза (2) от времени инкубации по [84].

логических структур. Он моделирует в ряде изящных экспериментов процессы «самоорганизации» коацерватов, основанные на том, что последние отделены от окружающего раствора четко выраженной поверхностью, но способны взаимодействовать с раствором избирательно, поглощая из внешней среды такие вещества, как аминокислоты, сахара, моноуклеотиды, а также выделяя во внешнюю среду продукты происходящих в них реакций. В общих чертах структуру обмена вещества и энергии в коацерватах можно представить в виде структурной схемы (рис. 36).

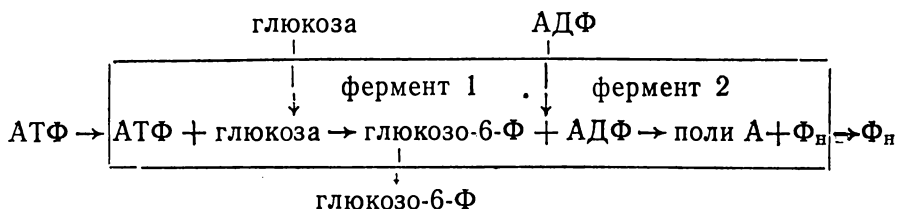
Рассмотрим с точки зрения этой схемы один из вариантов динамической устойчивости коацерватов [84]. Коацерватная капля из гистона и гуммиарабика погружена в раствор глюкозо-1-фос-



Под влиянием включенной в каплю глюкозилтрансферазы глюкозо-1-фосфат образует крахмал, за счет которого капля растет, если скорость «а» преобладает над скоростью реакции «б».

На основании рис. 36 измерением (получением сообщения) во внешней среде будет реагирование молекул глюкозо-1-ф внутри крацervата на парциальное осмотическое давление этих молекул вне его. Если вне коацervата давление больше, то идет диффузия внутрь. Так же происходит механизм обмена остальными ингредиентами.

С точки зрения самоорганизации особенно интересна модель, при которой в коацervате происходят реакции согласно схеме



Характерно, что эти реакции в коацervатах идут со значительно большей скоростью, чем в растворе, и ведут к росту коацervатов. Был поставлен следующий опыт [84]: организованы две системы коацervатов, каждая из которых одинаково состояла из гистона и энзимных белков, но в первую включали глюкозу и комбинацию из двух энзимов (полинуклеотидфосфорилазы и гексокиназы), а во вторую — только полинуклеотидфосфорилазу. И те и другие находились в растворе АТФ, содержащем 20% АДФ. Из представленного на рис. 37 графика [84] видно, что коацervаты, обладающие более совершенной организацией (система гистон—гексакиназа—полинуклеотидфосфорилаза), растут значительно быстрее, чем менее совершенные (система гистон—полинуклеотидфосфорилаза) в идентичных условиях внешней среды.

А. И. Опарин отмечает, что здесь уже видны зачатки некоторого предбиологического естественного отбора. Он считает, что эта закономерность легла в основу всей дальнейшей эволюции пробионтов. Дальнейшая самоорганизация пробионтов идет по пути образования некоторых структур, являющихся исходными для построения мембран клеток, их органелл и т. п. Вариант образования на поверхности воды замкнутых пузырьков в белково-липидной оболочке показан Гольдейкром [по 72] (рис. 38). Эти образования уже имеют многие черты биологических мембран.

Очевидно, что все этапы самоорганизации проходят синергически, включая в себя параллельно развитие на молекулярном, межмолекулярном и надмолекулярном уровнях. Первыми в области исследования возможности образования некоторой «предформы» (*prepattern*) на основании изучения кинетики реакций, входящих в систему веществ и диффузионных процессов, были работы выдающегося кибернетика А. Тьюринга. Своеобразна и трагична судьба этого ученого. В 1936 г. он предлагает теоретическую модель «машину Тьюринга», включающую большинство ныне используемых идеологических основ структуры и алгоритмов

ЭВМ [85]. В его работах, по нашему мнению, также были заложены основы для создания систем искусственного интеллекта, т. е. содержались многие мысли, лежащие в основе той науки, которую в настоящее время называют *кибернетикой*. Роль Тьюринга в создании кибернетики очень слабо замечена. В своей книге «Кибернетика», считающийся ее основателем Н. Винер упоминает А. Тьюринга мимолетного упоминания: «Тьюринг был, пожалуй, первым среди ученых, исследовавших логические возможности ма-

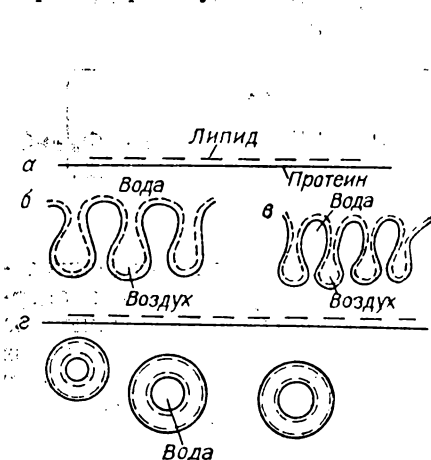


Рис. 38. Стадии образования пузырьков Гольдейкра [85].

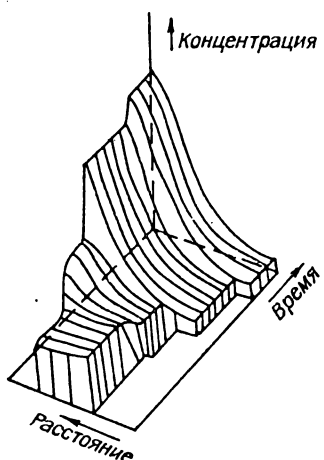


Рис. 39. Эволюция пространственного и количественного состояния субстанции «активатора» по [88].

шин с помощью мысленных экспериментов». И вот в 1952 г. Тьюринг снова удивляет научный мир своей совершенно нетрадиционной и пионерской работой по морфогенезу в химических системах [86]. Он показал, что в системах, содержащих вещества, из которых может возникнуть «форма», способные к химическим реакциям и диффузии, небольшая флуктуация одного из параметров системы может привести к появлению существенной неоднородности их пространственной концентрации. Это может обусловить развитие некоторой регулярной структуры. Однако, как и в случае своей знаменитой «машины», Тьюринг снова отодвинут на задний план другими более удачливыми последователями. Отдавая дань этому таланту, мы считаем, что одним из основателей *молекулярной кибернетики* можно по праву считать Алана М. Тьюринга.

Дальнейшие работы по морфогенезу были проведены Пригожиным и Николисом [87]. Позже Герер и Мейхард [89, 99] показали, что существует довольно ограниченное число химических реакций, допустимых в эволюционирующих системах. Согласно [88, 89], основная идея в описании реакций такого типа — уси-

ление локальной гетерогенности системы за счет сильной автокаталитической обратной связи. Выявляющаяся постепенно «форма» стабилизируется антагонистическим эффектом субстанции с более высокими диффузионными параметрами. Мейнхард пишет [90], что окончательная форма организма не может быть заложена в латентном виде в яйце, но может выявляться в серии последовательных решений, благодаря которым путь развития одной из ячеек отличается от путей развития остальных. Если регион, в котором происходит такая реакция, достаточно мал по сравнению со всем объемом вещества, обуславливающего автокатализ, то возможно только гомогенное равновесие двух веществ в системе. С увеличением размера региона (большинство биосистем увеличивается при развитии, в том числе и модельные коацерваты А. И. Опарина) гомогенное равновесие в системе будет нарушаться, и на одной из границ возникает высокая концентрация катализатора и ингибитора. Такие бифуркации в системе будут вносить некоторый вклад асимметрии в распределение инградиентов. Можно найти примеры и в неживой природе, когда начальная незначительная флуктуация формы приводит к появлению стабильных и ярко выраженных структур (очертания рек, другие элементы рельефа местности).

Опишем упрощенно вариант возникновения *предформы* согласно [88]. Уравнения состояния системы представим в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= c \frac{a^2}{h} - \mu a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \rho_0; \\ \frac{\partial h}{\partial t} &= ca^3 - \nu h + D_h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \rho_1.\end{aligned}\quad (6.13)$$

Производство активатора a должно быть нелинейно, причем таким образом, чтобы его нормальная убыль a компенсировалась автокатализом. В выражении ρ_0 и ρ_1 — некоторые производимые количества субстанций, не зависящие от концентраций ингибитора и активатора. На рис. 39 показано результирующее пространственное распределение субстанции a .

Отметим, что в результате такого рода синергических процессов в системе возникает некоторое неравновесное стабильное состояние. Это состояние можно охарактеризовать критерием сложности. Вольперт [91] называет такое состояние «*информацией расположения*».

Трапезников [92] показал, что для стабилизации пузырьков необходима подвижность молекул слоя и способность залечивать разрывы в нем. Существенную роль в стабильности пленок играет [99] раздельная двумерная миграция и адсорбция компонентов, обладающих различной подвижностью и поверхностной активностью. Характерно, что в процессе образования пленки в нее переходят преимущественно наиболее подвижные и поверхностно-активные компоненты и, как следствие этого, состав пленки ад-

сорбционных слоев нередко отличается от состава раствора. Мы привели эти результаты для того, чтобы показать, что в реальных коллоидных системах создаются условия как для развития по механизму коацерватов А. И. Опарина, так и для срабатывания бифуркационного механизма развития формы, чтобы, говоря словами Пригожина, произошло «выявление порядка флуктуации».

Как отмечает Мейнхард [90], любая асимметрия в параметрах, оказывающих влияние на продукцию активатора и ингиби-

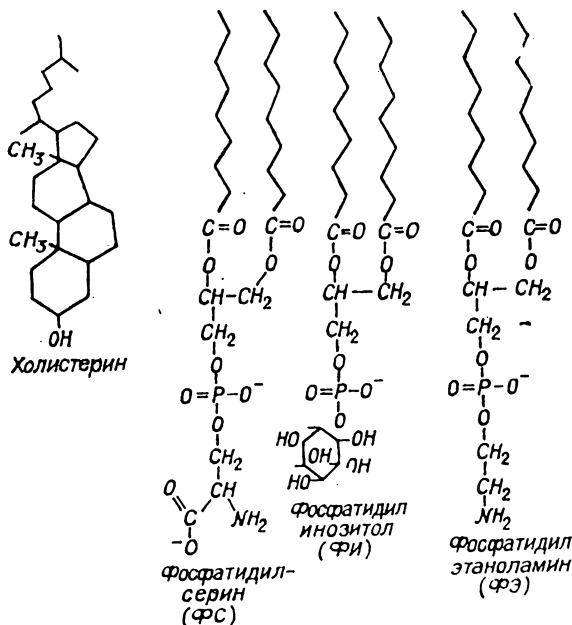


Рис. 40. Структурные схемы нескольких важнейших липидов.

тора в системе, приводит к ориентации эволюционирующей формы. Причем это может быть изменение pH, температурный градиент, изменение кинетики удаления одного из компонентов. Он приводит примеры образования симметричных структур, имеющих форму неправильной окружности с полностью симметричными элементами на обеих ее сторонах. Такими закономерностями пытаются объяснить появление симметричных органов (глаз, рук, ног и т. п.) у биологических организмов.

В небιологических коллоидных системах обнаружено [42], что во внутренней части пленок ПАВ возникают особые структуры, являющиеся следствием перехода в пленку (в процессе ее образования) коллоидных частиц и частей структуры, сформировавшихся в объеме раствора. Такие *структоны* внутри пленок делают их еще более устойчивыми.

Выводимые различными исследователями варианты самоорганизации в биосистемах по бифуркационному механизму предполагают следующие допущения [93]:

чтобы передать «химическую информацию» (в том виде, в котором мы предполагали это понятие при описании автоматов коллоидных систем), через всю систему молекулы транспортируются на значительные расстояния между ячейками;

полностью пренебрегается существование границ, разделяющих ячейки;

молекулы, ответственные за процесс самоорганизации, должны быть относительно небольшими, чтобы проникать через мембраны ячеек;

две активные химические субстанции должны реагировать по своеобразной сложной нелинейной кинетике;

данная ячейка не может быть в прямом контакте со своим соседом.

Как отмечено в работе [93], во многих биологических системах эти ограничения нарушаются. Ячейки (клетки) имеют мембраны, их ограничивающие. В мембранах имеются поры и каналы для транспорта молекул значительных размеров. Может происходить активизация производства ингибитора или активатора на уровне механизма «межфазного» катализа и т. п. На рис. 40 показаны структурные схемы нескольких важнейших липидов, входящих в состав биологических мембран [94]. Какую же роль играет количество составляющих в случае, если в системе происходят бифуркации, ведущие к пространственной самоорганизации? Как показано Баблюнцем [93], чем выше сложность связей, разнообразие их в системе, тем устойчивее бифуркационные состояния. Это полностью соответствует общему кибернетическому закону необходимой сложности и разнообразия системы.

БИФУРКАЦИЯ, УСТОЙЧИВОСТЬ, ТЕОРИЯ КАТАСТРОФ, ТЕРМОДИНАМИКА ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ

— Я считаю, что они играют не совсем по правилам, — начала Алиса жалобным голосом, — и они так ужасно ссорятся, что не слышат друг друга. Кажется, у них вообще нет каких-либо правил. В конце концов, даже если они есть, никто их не выполняет...

(Льюис Кэрролл
«Алиса в стране чудес»)

В описании предметов, приведенных в названии данной главы, пока не существует единства ни в подходе, ни в определении исходных положений, ни в терминологии. Более того, представители соответствующих научных направлений часто просто пытаются представить соседнюю область в виде по меньшей мере незначительного частного случая своей. Так, активные пропагандисты теории катастроф Постон и Стюарт [95] пишут, что в подходе брюссельской школы, более элементарном с математической точки зрения, бифуркационные диаграммы в большинстве случаев, по-видимому, представляют собой частные неустойчивые сечения каспидных катастроф. Не менее четко высказались Николис и Пригожин [96], считающие, что лишь один незначительный частный случай теории катастроф может быть применен в термодинамике открытых систем.

В связи с этим авторы заранее приносят свои извинения за могущие возникнуть недоразумения в терминологии и некоторую фрагментарность изложения, обусловленную стремлением соблюдать максимальную объективность в представлении этих взаимно пересекающихся отраслей науки.

7.1. Некоторые исходные определения математики в приложении к теории бифуркации

Термин *бифуркация* (*abzweigung*) был введен, по-видимому, К. Якоби в его исследованиях бифуркаций сфероидальных фигур равновесия. Французское слово в привычном для нас значении (*bifurcation*) введено Пуанкаре. Вообще говоря, Пуанкаре можно по праву считать человеком, впервые сформулировавшим следующую задачу: не интегрируя заданного дифференциального уравне-

ния, по свойствам правой его части дать возможно более полную картину расположения кривых, удовлетворяющих этому уравнению.

Чтобы представить, что такое бифуркация, приведем распространенный пример [97] о нагрузке на колонну.

Если на колонну прямоугольного сечения сверху действует нагрузка, и она увеличивается, то произойдет следующее. Вначале колонна будет укорачиваться и утолщаться, но с сохранением

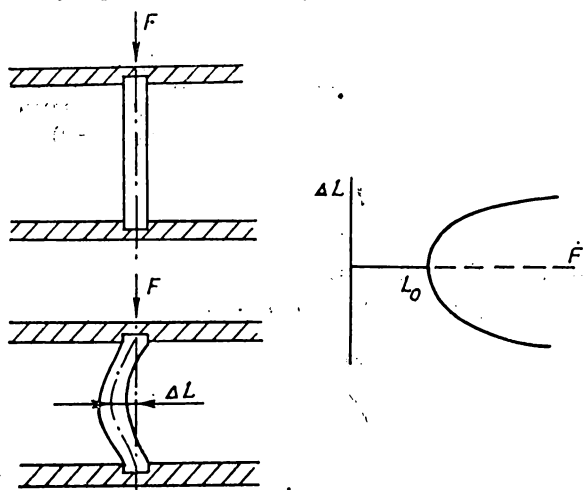


Рис. 41. Бифуркация формы колонны.

полностью вертикального положения своей оси. При некотором критическом значении $F > F_k$ произойдет качественное изменение хода процесса. Колонна прогнется вправо или влево, ее ось потеряет вертикальное положение, т. е. при $F < F_k$ у колонны есть всего одна равновесная форма, а при $F > F_k$ их становится три: вертикальная прямолинейная (ставшая неустойчивой) и две устойчивые (одна соответствует прогибу влево, другая — вправо). Если нарисовать зависимость максимального отклонения оси колонны от состояния равновесия от нагрузки $L = f(F)$, то видно (рис. 41), что при $F > F_k$ изменяется число состояний равновесия и их устойчивость. Изменение числа и устойчивости решений уравнения и называется бифуркацией решений.

Для введения читателя в область теории бифуркаций представляется необходимым дать некоторые исходные представления о решении эволюционного уравнения вида [98]

$$\frac{dv}{dt} = F(t, \mu, v), \quad (7.1)$$

где $t \geq 0$ — время, μ — параметр, лежащий на вещественной прямой $-\infty < \mu < \infty$. Уравнение (7.1) описывает эволюцию $v(t)$.

берущую начало от ее исходного значения $v(0) = v_0$. Отметим, что равновесным является решение, к которому стремится $v(t)$ после сообщения системе начального возмущения. В принципе может существовать много равновесных распределений:

$$F(\mu, v) = (a_1(\mu) - v)(a_2(\mu) - v) \cdots (a_n(\mu) - v), \quad (7.2)$$

каждое из которых соответствует равенству нулю одного из множителей $a_e(\mu) = v$.

Отметим также, что $v=0$ не является решением эволюционной задачи типа (7.1), так как правая часть уравнения отлична от нуля при $v=0$, а $a_1(\mu)a_2(\mu) \dots a_n(\mu) \neq 0$. Без учета граничных условий в задачах, связанных с дифференциальными уравнениями в частных производных, правая часть при $v=0$ задается выражением

$$F(t, \mu, 0) \neq 0.$$

Дальнейшее рассмотрение будет ограничиваться задачами, в которых правая часть при $v=0$ удовлетворяет условию

$$F(t, \mu, 0) \det F(\mu, 0) \neq 0 \text{ и } F(\mu, v) \text{ не зависит от } t \quad (7.3)$$

(def означает, что равенство принимается по определению) или

$$F(t, \mu, 0) = F(t + T, \mu, 0) \neq 0 \quad (7.4)$$

т. е. T — периодична.

Если $F(\mu, v)$ не зависит от t , то задачу

$$\frac{dv}{dt} = F(\mu, v) \quad (7.5)$$

называют *автономной*.

Если $F(t, \mu, v)$ периодическая по t с периодом T , то задачу

$$\frac{dv}{dt} = F(t, \mu, v) = F(t + T, \mu, v) \quad (7.6)$$

называют *неавтономной T-периодической*.

7.1.1. РАВНОВЕСНЫЕ РЕШЕНИЯ

Один из основных признаков бифуркации состоит в появлении решений, которые нарушают свойства симметрии правой части при $v=0$.

Например, кроме упомянутых выше первых двух типов решений, можно получить:

1. Стационарные решения автономных задач.

2. Т-периодические решения неавтономных задач и третий вариант:

3. τ -периодическое решение $v(t) = v(t + \tau)$ или $u(t) = u(t + nT)$ автономной задачи (7.5) или:

4. Субгармонические решения $v(t) = v(t + nt)$ (где $n=1, 2, 3, \dots$) неавтономных T -периодических задач типа (7.6).

Отметим, что можно также получить бифуркационные решения.

5. Субгармонические *бифуркационные* решения от τ -периодических решений автономных задач.

Например, допустим, что существует τ -периодическое решение уравнения в локальной форме

$$\frac{du}{dt} = f(\mu, u(\mu, t)), \quad u(\mu, t) = u(\mu, t + \tau), \quad (7.7)$$

в котором

$$\frac{du}{dt} = F(\mu, v + u) - F(t, \mu, v) \det f(\mu, u). \quad (7.8)$$

В этом случае f автономна даже тогда, когда и зависит от t . Возмущение v решения $u(\mu, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d(u + v)}{dt} = f(\mu, u(\mu, t) + v(t)). \quad (7.9)$$

Если существуют периодические решения (7.9)

$$u(\mu, t) + v(t) = u(\mu, t + \tilde{\tau}) + V(t + \tilde{\tau}), \quad \text{где } \tilde{\tau} \rightarrow n\tau; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

при $v \rightarrow 0$, то решение $u + v$ называют субгармоническим.

6. Бифуркация периодических решений автономных и неавтономных задач в «асимптотически квазипериодические решения».

В общем случае бифуркационные решения представляют собой равновесные решения, которые образуют пересекающиеся ветви в соответствующем функциональном пространстве.

Например, в одномерном пространстве (\mathbb{R}^1) бифуркационные решения образуют пересекающиеся ветви кривой $F(\mu, v) = 0$ на плоскости (μ, v) ; в двумерном (\mathbb{R}^2) — связанные пересекающиеся поверхности или кривые в трехмерном пространстве (μ, v_1, v_2) . Можно сказать, что одно равновесное решение ответвляется от другого при $\mu = \mu_0$ (т. е. происходит бифуркация), если существуют два различных равновесных решения $v^{(1)}(\mu, t)$ и $v^{(2)}(\mu, t)$ эволюционной задачи, непрерывные по μ и такие, что

$$v^{(1)}(\mu_0, t) = v^{(2)}(\mu_0, t).$$

Представляется необходимым дать определения точек, изображающих решения эволюционных уравнений:

1. Регулярная точка уравнения $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — это такая точка, для которой выполняются условия

$$F \neq 0 \quad \text{или} \quad F_\varepsilon \neq 0. \quad (7.10)$$

Если (7.10) выполняется, то можно найти единственную кривую $\mu = \mu(\varepsilon)$ или $\varepsilon = \varepsilon(\mu)$, проходящую через эту точку.

2. Регулярная экстремальная точка — точка, в которой изменяется знак и $F_\mu(\mu, \varepsilon) \neq 0$.

3. Особая точка кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — это точка, в которой $F_\mu = F_\varepsilon = 0$.

4. Двойная точка кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — это особая точка, через которую проходят две и только две ветви $F(\mu, \varepsilon) = 0$, имеющие разные касательные.

5. Особая экстремальная (двойная) точка кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — двойная точка, в которой μ_ε изменяет знак на одной ветви.

6. Точка возврата кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — это точка касания второго порядка между двумя ветвями кривой (две ветви кривой имеют в точке возврата одну и ту же касательную).

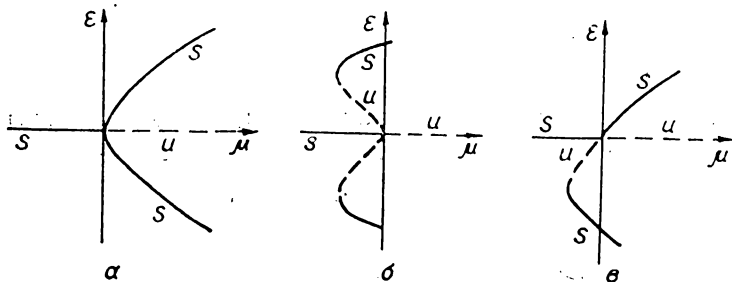


Рис. 42. Типичные виды бифуркационных диаграмм:

а — односторонняя суперкритическая бифуркация; б — односторонняя субкритическая бифуркация; в — двусторонняя бифуркация.

7. Сопряженная точка — это изолированное особое точечное решение уравнения $F(\mu, \varepsilon) = 0$.

8. Особая точка высокого порядка кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$ — точка, в которой три вторые производные от F равны нулю.

Отметим, что бифуркация может соответствовать: 1) двойной точке кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$. Решения (μ, ε) уравнения $F(\mu, \varepsilon) = 0$ имеют двойную точку бифуркации в (μ_0, ε_0) , если две кривых с различными касательными проходят через эту точку; 2) точке возврата кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$; 3) особой точке высокого порядка кривой $F(\mu, \varepsilon) = 0$. В ней может существовать «тройная точка бифуркации».

Анализ бифуркации часто проводят для случая двойной точки, поскольку такого рода бифуркации — самая распространенная форма бифуркаций в сингулярной точке. Другие типы бифуркаций (точки возврата, тройные точки и т. п.) встречаются значительно реже, поскольку для них необходимы определенные соотношения между старшими производными от $F(\mu, \varepsilon)$. Последние случаи часто называют необщими бифуркациями.

Устойчивость двойной точки бифуркации анализируют при редукции уравнения к локальной форме (рис. 42).

Если $F(\mu, 0) = 0$ для всех μ , то $F_\mu(0, 0) = F_{\mu\mu}(0, 0) = 0$, и условие строгой потери устойчивости решения $\mu = 0$ при переходе μ через ноль принимает вид

$$\sigma_\mu^{(1)}(0) = F_{\mu\varepsilon}(0, 0) \neq 0. \text{ Пусть } > 0, \quad (7.11)$$

тогда $D = F_{\mu\varepsilon}^{(2)} > 0$ и

$$\sigma_\varepsilon^{(2)}(\varepsilon) = -\mu_\varepsilon^{(2)}(\varepsilon) \sigma_\mu^{(1)}(0) \{\varepsilon + o(\varepsilon)\}. \quad (7.12)$$

7.2. Устойчивость

Исследуя поведение системы, стремятся, как правило, получить ответ на вопрос о том, сильно ли изменяется поведение системы в результате небольших возмущений. Эти понятия *сильно, небольшие*, достаточно расплывчаты. Так же трудно объяснить, что считать *близким* к равновесию, а что *далеким* от него. По-видимому, здесь можно построить некую концепцию относительности, однако это выходит за рамки данной книги.

Для конкретизации этих представлений воспользуемся подходом Ляпунова, приведенным в работе [99]. Здесь рассматривается система с точкой равновесия в начале координат и уравнением, описывающим происходящий в ней процесс:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x, t), \quad x(0) = c, \quad f(0, t) = 0. \quad (7.13)$$

Когда система выведена из равновесия «малым» возмущением ($c \neq 0$), останутся ли траектории процесса на «небольшом» расстоянии от начала координат? Если решение уравнения процесса начинается в пределах небольших расстояний от начала координат, то оно должно оставаться с течением времени в пределах некоторого «канала», распространяющегося от начала координат вдоль оси ординат (т. е. времени). В этом случае система устойчива в классическом смысле.

Классическая теория устойчивости, по мнению Касты [99], не может, как правило, применяться в анализе сложных систем, изучаемых биологией, экономикой (молекулярной кибернетикой). Режим существования таких сложных систем во многих случаях далек от равновесного, а внешние воздействия могут постепенно менять и само положение равновесного состояния.

В этих случаях полезно ввести понятие структурной устойчивости. Основная задача — выявление качественных изменений в траектории движения при изменениях структуры самой системы. Поведение данной системы изучается по отношению к поведению всех «близких» к ней систем данного класса. Если система при небольших изменениях своей структуры ведет себя «почти так же», как «соседние», то она структурно устойчива, в противном случае — структурно неустойчива.

Можно показать [99], как определяется структурная устойчивость системы на примере гармонического осциллятора, подчиняющегося уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + c_1 \frac{\partial x}{\partial t} + c_2 x &= 0; \\ x(0) &= 0, \quad \frac{\partial x}{\partial t}(0) = 0. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Если рассмотреть влияние значений параметров системы c_1 и c_2 на ее поведение, то увидим, что имеются три случая:

$c_2 - c_1 = 0$ (система «без трения»), тогда все траектории системы — концентрические окружности с радиусами a/c_2 и центром в начале координат;

$c_1 > 0$, если $c_1^2 > 4c_2$, то точка равновесия $x = \dot{x} = 0$ на плоскости (x, \dot{x}) — узел, если $c_1^2 < 4c_2$, то фокус (рис. 43). Главное здесь, что в случаях $c_1 \neq 0$ начало координат является положением устойчивого равновесия по отношению к небольшим изменениям c_1 или c_2 . В случае же $c_1 \neq 0$, когда начало координат — центр, по-

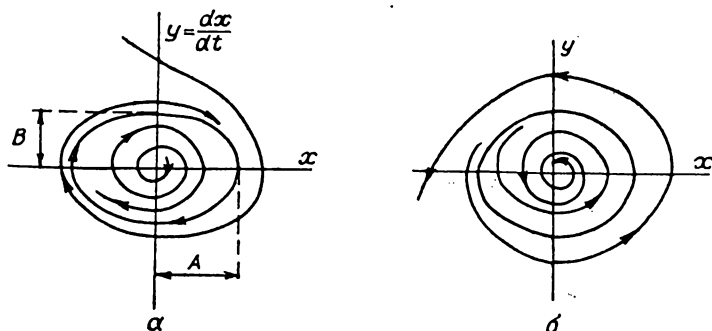


Рис. 43. Виды устойчивых траекторий системы

a — фокус; b — узел.

ведение системы резко меняется при сколь угодно малых изменениях c_1 .

То есть при $c_1 \neq 0$ система структурно устойчива, при $c_1 = 0$ — неустойчива.

Заметим, что система как бы притягивается к устойчивому состоянию после окончания действия на нее возмущений (раскачанный маятник останавливается). У сложных систем имеется, как правило, несколько устойчивых состояний (областей притяжения).

7.3. Аттракторы

Установившиеся режимы движения систем в функциональном пространстве [100] названы аттракторами, так как они «притягивают» соседние режимы (переходные процессы). Аттрактор — это притягивающее множество в фазовом пространстве. Аттракторы подверглись довольно серьезному исследованию в теории нелинейных систем автоматического регулирования. Так, рассмотрим фазовые траектории системы, представленные на рис. 43 [101]. Если в начальные моменты времени система оказывается неустойчивой и процесс начинает расходиться, то по достижении некоторой амплитуды расходящихся колебаний она стабилизируется и превращается в устойчивую автоколебательную систему. Характерно, что к этому контуру (устойчивому) приближаются

спирали фазовых траекторий, не только выходящие из начала координат, а и находящиеся вне этого контура (рис. 43). Этот замкнутый контур, представляющий по мнению авторов работы [101] наиболее важный для теории автоматического регулирования тип особых линий на фазовой плоскости, называют устойчивым предельным циклом, или, как определено выше, аттрактором. Этот аттрактор соответствует устойчивым автоколебаниям системы. Размеры его предельного цикла A и B (рис. 43) представляют ампли-

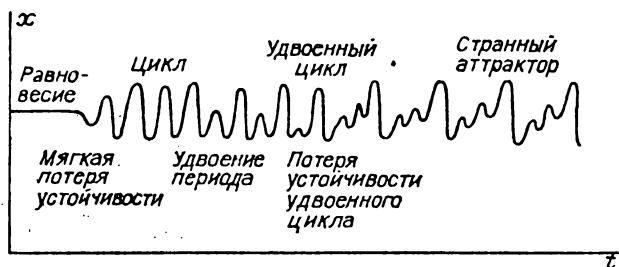


Рис. 44. Виды аттракторов.

туды колебаний самой величины x и скорости ее изменения $y = dx/dt$.

Случаю устойчивости систем «в малом» и неустойчивости «в большом» соответствует картина фазовых траекторий (рис. 43). Граница начальных условий, до которых система устойчива, в большинстве случаев на фазовой плоскости имеет вид неустойчивого предельного цикла (как на рис. 43), от которого в обе стороны удаляются спиралевидные фазовые траектории.

Доказано [102], что потеря устойчивости состояния равновесия может произойти в результате рождения предельного цикла (радиуса порядка $\sqrt{\epsilon}$, когда значение параметра отличается от бифуркационного на ϵ) (устойчивость равновесия [100] переходит к циклу, а само равновесие становится неустойчивым (рис. 43, а), либо в результате гибели неустойчивого предельного цикла. При этом область притяжения положения равновесия уменьшается с ним до нуля, после чего цикл исчезает, а его неустойчивость передается равновесному состоянию. Последним случаем потери устойчивости может быть «столкновение» какого-либо устойчивого положения равновесия динамической системы с неустойчивым положением равновесия. При этом система совершает скачок, переискакивая на совершенно отличный режим — при небольшом изменении параметра равновесное состояние в рассматриваемой окрестности исчезает. Скачки такого рода [100] обусловили появление термина *теория катастроф*. Представляется необходимым описать еще один вид аттракторов, которые отличны и от состояний равновесия и от строго периодических колебаний. Их называют *странными аттракторами*. Переход системы на такой режим означает [100], что в ней наблюдаются сложные непериодические колебания, де-

тали которых очень чувствительны к малому изменению начальных условий и не зависят от начального условия (при его изменении в некоторой области). Переход от устойчивого состояния равновесия процесса (например, ламинарного течения жидкости) может совершаться как скачком (при жесткой или катастрофической потере устойчивости), так и после мягкой потери устойчивости (рис. 44). В последнем случае родившийся цикл сам теряет устойчивость.

7.4. Катастрофы

Введение самого понятия *теория катастроф* обычно связывают с работой Тома [104], хотя независимо от него основные математические результаты были получены Арнольдом [105].

В теории катастроф решается вопрос — приводит ли изменение системы к смещению ее состояния в другую область притяжения. При этом обычно постулируется, что поведение изучаемой системы описывается какой-то потенциальной функцией, локальные минимумы которой соответствуют устойчивым состояниям. Одно из ощутимых преимуществ теории катастроф — это то, что в ней не нужно точно определять данную функцию.

Ниже мы приведем некоторые математические представления *элементарной* теории катастроф. Кстати, как пишут авторы работы [95], термин элементарные катастрофы ввел Том, имея в виду элементы как некие первичные узлы систем (по аналогии с химическими элементами).

Однако, прежде чем перейти к математике, необходимо рассмотреть применение теории катастроф к общему описанию сложных систем.

Система описывается (согласно подходу, данному в главе 9) в виде «черного ящика», определяемого набором входных и выходных величин. Предположим, что на систему подают некоторый набор входных воздействий и ждут, пока не наступит равновесное состояние выходных величин, затем изменяют значения входных величин, снова ждут и т. д. Поступая в такой последовательности, получают поверхность устойчивых состояний, которая дает многозначную функцию выходов. Притом катастрофа соответствует скачкообразному изменению выходных параметров при непрерывном изменении входных. Авторы позволяют себе, развивая представление работы [99], сформулировать определение отдельных общих характеристик систем, описываемых в рамках теории катастроф.

Определение. Для любой динамической системы, динамика которой принадлежит к градиентному типу $P\{x_i, y'_i\}$, имеющей k входных (управляющих) величин x_1, x_2, \dots, x_k и k наборов выходных величин

$$\{(y'_1, y''_1, \dots, y^{n_1}_1), (y'_2, y''_2 \dots y^{m_2}_2) \dots (y'_k, y''_k \dots y^{r_k}_k)\},$$

для каждого x_i существует некоторая функция $f\{x_i, y_i'\}$, имеющая локальные минимумы:

$$\forall PA x_i \exists (f\{x_i, y_i'\} \leq f\{x_i, y_i'\}).$$

Следствием этого определения будет утверждение о том, что для множества существующих в природе непрерывных процессов имеется ряд состояний с локальным минимумом некоторой функции, описывающей эти процессы.

Это утверждение свидетельствует, что в природе априорно существуют дискретные состояния (которые, как доказывается в теории катастроф, являются центрами «притяжения», т. е. некими локальными устойчивыми состояниями существующих систем).

Данный принцип «дискретности» обеспечивает строгий подход к проблемам идентификации объектов, задачам оптимального управления, создания материалов, определения критериев надежности и употребляемости материалов и т. д.

Интересно, что не через теорию катастроф, а независимо от нее разработана теория так называемых многоустойчивых элементов (МУЭ) вычислительной техники, созданы реальные их конструкции [103, 108]. На основе МУЭ можно реализовать любые вычислительные структуры многозначной логики, в том числе устройства памяти. Не вызывает сомнений, что такого рода «многоустойчивостью» обладают рассматриваемые в нашей книге молекулярные системы. Представляется целесообразным использовать аппарат описания вычислительных МУЭ для описания молекулярных систем, оптимизации их свойств и создания на их базе *молекулярных вычислительных структур*.

Отметим, что преимущество теории катастроф — возможность выбрать небольшое конечное число «канонических» потенциалов в качестве моделей поведения изучаемой системы, предполагая [99], что «истинная» функция t , какой бы она не принимала вид, будет отличаться от канонической модели только результатом преобразования координат. А теорема Тома (главная в теории катастроф) гарантирует структурную устойчивость канонической модели.

В кибернетике очень важным является создание в устройстве памяти модели процесса, которая может служить основой для управления, адаптации, самоорганизации системы.

Наличие таких дискретных зон устойчивости, которые могут служить своеобразным «устройством памяти» в мире молекул, может позволить последним самоорганизовываться без воздействия извне, т. е. открывается возможность возникновения самоорганизующихся или по крайней мере адаптивных систем, подобных описанным в главе 9, но со всеми нужными элементами, находящимися внутри самой молекулярной системы.

Перед тем как перейти к более формальному описанию функций теории катастроф, покажем, что они возникают как результат математического описания многих известных физических процессов.

Так, в биологии для описания динамики популяций животных или растений, а также первичной групповой эволюции молекул часто применяют логистическое [99] уравнение

$$\frac{\partial x}{\partial t} = (V - hx)x, \quad (7.15)$$

где V — внутренняя скорость роста без лимитирующего влияния среды; h — вклад единицы популяции в уменьшение внутренней скорости роста вследствие влияния плотности. Видно, что при $Vx = hx^2$ рост популяции прекращается.

Эта модель предполагает, что закон уменьшения при добавлении к популяции каждой следующей особи линеен относительно x . Очевидно, что во многих случаях эта зависимость более сложна, в частности, квадратична:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = (V - hx^2)x. \quad (7.16)$$

При учете вымирания отдельных видов

$$\frac{\partial x}{\partial t} = (V - hx)^2 x - b,$$

или

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -[x^3 - (-V)x + b]. \quad (7.17)$$

Здесь полагаем $V=1$. Этого несложно добиться, разделив все уравнение на v . Таким образом, развитие логистической модели привело к каноническому уравнению теории катастроф типа «сборки».

Согласно [95], в рассмотрении будем исходить из семейства функций

$$V: S \times C \rightarrow R, \quad (7.18)$$

где S — некоторое многообразие (IR^n), C — другое многообразие (IR^r). Назовем IR^n — пространством состояний, а IR^r — пространством управления. Число r — это размерность деформации. Многообразием катастрофы называют подмножество в $IR^n \times IR^r$, определенное уравнением

$$D V_c(x) = 0, \quad (7.19)$$

где $V_c(x) = V(x, c)$. Это множество всех критических точек всех потенциалов V_c из нашего семейства. Отображением катастрофы χ называют ограничение на M естественной проекции

$$\pi: IR^n \times IR^r \rightarrow IR^r; \quad \pi(x, c) = c. \quad (7.20)$$

Особое множество S — подмножество в M , состоящее из особых точек отображения χ . Это точки, где χ особо, т. е. ранг производной $D\chi$ меньше, чем r . Образ особого множества $\chi(S) \subset C$ называют бифуркационным множеством B . Ниже мы рассмотрим самые простые катастрофы складки и сборки.

7.4.1. КАТАСТРОФА СКЛАДКИ

Выражение

$$V_a(x) = \frac{1}{3}x^3 + ax \quad (7.21)$$

называют катастрофой складки [95].

Числовой коэффициент a введен для упрощения дальнейших вычислений. Многообразие катастрофы M определяется уравнением

$$0 = \frac{d}{dx} V_a(x) = x^2 + a. \quad (7.22)$$

Это уравнение указывает, что в качестве карты для M нужно взять координату x ; общая точка многообразия μ записывается в виде

$$(x, a) = (x_1 - x^2). \quad (7.23)$$

Отвечающая этой точке функция на M имеет следующее разложение в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} V_a(x + X) &= \frac{1}{3}(x + X)^3 + (-x^2)(x + X) = \\ &= \frac{1}{3}X^3 + xX^2 + OX - \frac{2}{3}x^3. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Квадратичный член xX^2 при $x \neq 0$ невырожден, но при $x = 0$ — вырожден. Поэтому особое множество задается равенством $x = 0$ и состоит из одной точки $(0, 0) \in M$. При $x > 0$ квадратичный член положителен и потенциал V имеет минимум, при $x < 0$ — максимум.

7.4.2. КАТАСТРОФА СБОРКИ

Представим себе многообразие C . Пусть положение равновесия некоторой системы изменяется при изменении положения точки (a, b) .

Выражение

$$V_{ab}(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx \quad (7.25)$$

называют катастрофой сборки. Далее проведем анализ критических точек V [95].

Для заданной пары (a, b) критические точки функции (7.25) определяются из условия

$$0 = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx \right) = x^3 + ax + b. \quad (7.26)$$

Это кубическое уравнение по x , и поэтому оно имеет не более трех и не менее одного вещественного корня. Природа корней зависит от значений a и b , а именно от дискриминанта

$$D = 4a^3 + 27b^2 \quad (7.27)$$

рассматриваемого кубического уравнения. Известно, что если $D < 0$, имеются три различных вещественных корня, а если $D > 0$, то один вещественный и пара взаимно сопряженных комплексных корней. Если $D = 0$, то в некотором смысле имеется три вещественных корня, но некоторые из них совпадают: при $a \neq 0$ или $b \neq 0$ совпадает два корня, если $a = b = 0$, то совпадают все три корня. Геометрически это означает, что природа корней зависит от положения (a, b) , определяемого уравнением

$$4a^3 + 27b^2 = 0. \quad (7.28)$$

Разделим плоскость ab на пять подмножеств:

заштрихованную область I «внутри» кривой;

область E «вне» ее;

две ветви B_1 и B_2 кривой;

начало P .

Точки (a, b) , расположенные в I , характеризуются условием $4a^3 + 27b^2 < 0$, а точки, расположенные в E , условием $4a^3 + 27b^2 > 0$.

Отсюда:

если (a, b) лежит в E , то имеется один вещественный корень;

если (a, b) лежит в I , то имеются три различных вещественных корня;

если (a, b) лежит в B_1 или в B_2 , то имеются три вещественных корня, но два из них совпадают между собой; для B_1 происходит совпадение с наименьшим корнем, а для B_2 — с наибольшим;

если (a, b) совпадает с $P = (0, 0)$, т. е. $a = b = 0$, то имеются три совпадающих вещественных корня (все равны 0). Все эти варианты показаны на рис. 45. Соответствующие потенциальные функции имеют вид

$$V_{a,b}(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx,$$

показанный на рис. 46. Как видим, $V_{a,b}$ имеет один максимум, если $(a, b) \in E$; два минимума и между ними максимум, если $(a, b) \in I$; один минимум и одну точку перегиба для $(a, b) \in B_1$ или B_2 и один минимум для $(a, b) = P$. Отметим, что для B_1 точка перегиба расположена слева от минимума, а для B_2 — справа.

С точки зрения динамики минимума функции V отвечают устойчивым равновесиям, а максимумы или перегибы — неустойчивым. Итак, если наша пара управляющих параметров лежит в E , то имеется единственное положение устойчивого равновесия, а если в I , то имеются два устойчивых положения и одно неустойчивое. Это достаточно сложное поведение потенциальной функции можно охватить единой геометрической картиной, нарисовав мно-

гообразие катастрофы или поверхность равновесия в пространстве xab . Это множество точек, удовлетворяющих уравнению (7.26), которое мы перепишем так:

$$x^3 + ax + b. \quad (7.29)$$

Оно имеет вид поверхности со сборкой (рис. 45). Здесь целесообразно рассмотреть отображение катастрофы:

$$\chi: M \rightarrow C, \quad (7.30)$$

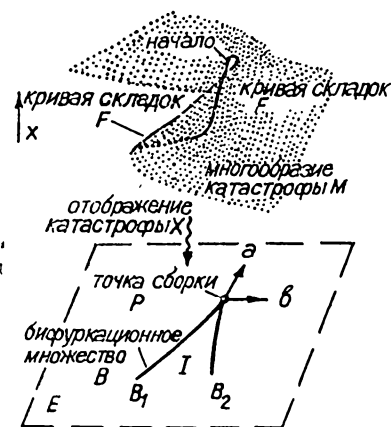


Рис. 45. Катастрофа сборки.

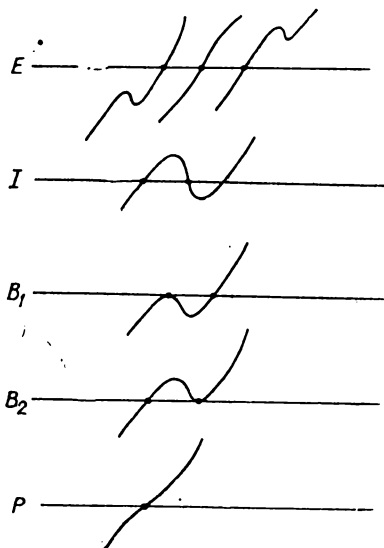


Рис. 46. Потенциальные функции, соответствующие катастрофе сборки.

которое проецирует точки M на плоскость C по правилу

$$(x, a, b) \rightarrow (a, b), x \in M \quad (7.31)$$

в окрестности начала.

Многообразие катастрофы μ — гладкое подмногообразие IR^3 . Точки M , в которых поверхность «подворачивается», «складывается» и в которых, следовательно, касательная плоскость вертикальна, — это в точности критические точки отображения катастрофы $\chi: M \rightarrow C$. Их можно найти, решая совместно уравнения (7.29) и

$$0 = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = 3x^2 + a. \quad (7.32)$$

Отсюда $a = -3x^2$. Подставляя это выражение в (7.29), получаем $b = 2x^3$. Таким образом, точки M , в которых касательная плоскость вертикальна, расположены на кривой, задаваемой параметрически как

$$(x_1 - 3x^2, 2x^3),$$

где x — вещественный параметр. Это скрученная кубическая кривая, лежащая на M , которую мы назовем кривой складки и обозначим F . Образ кривой при отображении на плоскость C определяется уравнением

$$4a^3 + 27b^2 = 0. \quad (7.33)$$

Это полукубическая парабола. Ее называют [95] бифуркационным множеством (поскольку при сдвиге с нее точки (a, b) появляются функции двух различных типов) и обозначают B . В результате проведенного анализа можно дать геометрическое описание положений равновесия динамической системы. Для пары значений параметров (a, b) все положения равновесия получают, решая уравнение (7.26). Следовательно, они могут быть описаны как координаты тех точек, в которых вертикальная прямая, проходящая через (a, b) , пересекает многообразие катастрофы M . Геометрически очевидно, что если (a, b) лежит в области E , внешней по отношению к бифуркационному множеству B , то найдется лишь одно такое x . Действительно, над точками E лежит лишь один «лист» поверхности M . В то же время над точками (a, b) области I расположены три листа и соответственно имеются три положения равновесия. Для точки $(a, b) \in B_1$ вертикальная прямая, проходящая через (a, b) , касательна к нижнему листу и проходит через верхний лист в единственной точке; это дает для уравнения (7.26) два совпадающих корня и еще один, причем совпадающие корни меньше. Для $(a, b) \in B_2$ все аналогично, только теперь наблюдается касание верхнего листа и совпадающие корни больше. Наконец, в центре острия вертикальная прямая касается поверхности M и пересекает ее в одной точке — вначале. Отметим, что неустойчивые положения равновесия отвечают точкам поверхности M , лежащим на среднем листе «внутри» кривой складок, устойчивые — точкам «снаружи» кривой складок.

Рассмотрим теперь, как происходит изменение положения равновесия с изменением (a, b) . Пусть (a, b) проходит некоторый путь в C . Тогда наблюдаемое положение равновесия пройдет путь в M , лежащий над путем в C . Из-за складок поверхности M этому пути, возможно, придется прыгать с одного листа на другой. Предположим, что наша (непрерывная) физическая система делает соответствующие прыжки настолько быстро, что можно пренебречь затрачиваемым на это временем. Исследование положений равновесия само по себе не может показать, где же будут происходить прыжки, так как в принципе они возможны в любой точке (a, b) , над которой лежат два или более положений равновесия. Здесь авторы работы [95] рекомендуют применить введенный Томом [104] принцип максимального промедления, заключающийся в том, что система делает прыжок лишь тогда, когда у нее не остается другого выбора, например, при $\beta > \beta^*$ (см. главу 3). Это означает, что путь, проходимый положением равновесия, сменяет лист на поверхности лишь тогда, когда он проходит через «складку», и лист, на котором он находился, «исчезает».

Интересно показать, что исходя из геометрии многообразия катастроф можно предсказать наличие скачка в положениях равновесия недалеко от точки P в том случае, когда линия, по которой движутся эти положения, проходит через зону I . Такой путь показан на рис. 47. При этом видно, что прыжок происходит тогда, когда путь покидает область, а не входит в нее. Эти прыжки и являются примерами того [95], что называют катастрофическими прыжками (скачками). Переменные a и b называют управляющими переменными, или управляющими параметрами, а x — переменной состояния. Катастрофические прыжки происходят тогда, когда гладкие изменения в управлении вызывают разрывные изменения состояния.

Мы довольно детально остановились на описании катастрофы сборки, которую называют также сборкой Уитни. Поскольку этот вид катастроф повсеместно встречается в описании молекулярных систем, ими объясняются и многие явления гистерезиса и в первом приближении принцип *фазового коридора* для описания состояния кристаллов и жидких кристаллов гибкоцепных полимеров. Описывать остальные *элементарные катастрофы* столь детально не будем, так как этого не позволяет объем книги, а только их перечислим.

В качестве примера применения идей теории катастроф к описанию реальных молекулярных систем можно рассмотреть описанные в главе 5 полимерные системы, обладающие четырьмя «областями притяжения» — состояниями. Данный полимер может находиться в одном из четырех фазовых состояний:

- аморфная фаза со свернутыми цепями (АСЦ);
- аморфная фаза с вытянутыми цепями (АВЦ);
- кристаллическая фаза со свернутыми цепями (КСЦ);
- кристаллическая фаза с вытянутыми цепями (КВЦ).

На рис. 48 представлена изотерма данной системы. Как видим, она представляет собой сечение многообразия катастрофы сборки, причем характерно, что в данной системе имеется две поверхности катастроф — поверхность, на которую попадают значения свободной энергии системы в аморфном состоянии, и поверхность, на которую попадают значения свободной энергии системы в кристаллическом состоянии. Это и обуславливает своеобразие поведения такой системы. Так, при росте механического напряжения, приложенного к материалу (j), последний из состояния АСЦ движется вправо, и в полном соответствии с «принципом максимального промедления» Тома происходит скачок функции на верхнюю ветвь — АВЦ. Все бы было именно так, если бы не ветвь, лежащая несколько ниже. Верхняя ветвь поверхности энергии соответствует системе в кристаллической фазе (КВЦ). Именно

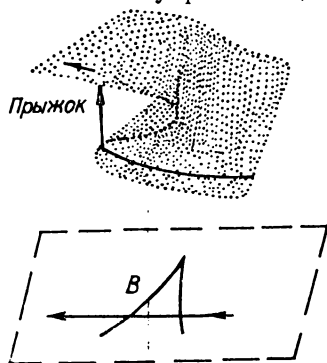


Рис. 47. «Скачок» катастрофы сборки.

на нее, а не на ветвь АВЦ, попадает система, образуя в итоге высокопрочный полимер с параллельно уложенными кристаллами. Состояние АВЦ при уменьшении нагрузки переходит опять-таки по «принципу максимального промедления» в состояние АСЦ. Для сохранения состояния КВЦ при снятии напряжения применяется ряд мер, описание которых выходит за рамки этой простой модели.

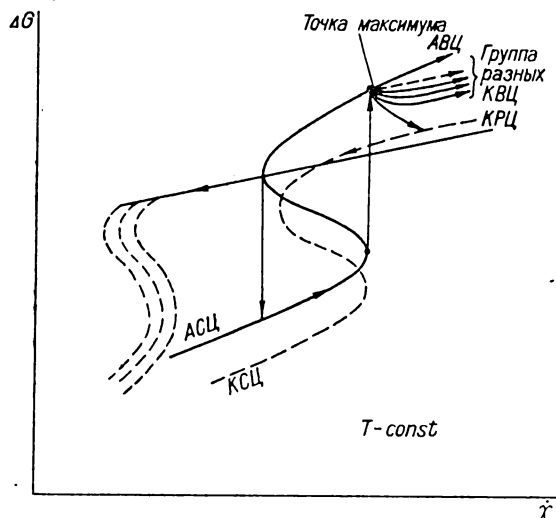


Рис. 48. Изотерма полимерной системы под действием механического напряжения.

7.5. Остальные катастрофы и теорема Тома

Теорема Тома [104] формулируется следующим образом [95]: в типичном случае r -параметрическое семейство гладких функций $IR^n \rightarrow IR$ для всякого n и всех $r \leq 5$ структурно устойчиво и эквивалентно вблизи любой точки одной из следующих форм: некритическая

$$u_1;$$

невырожденная критическая (или морсовская)

$$u_1^2 + \dots + u_i^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_n^2 \quad (0 \leq i \leq n).$$

Первые два типа не являются формами катастроф, так как не зависят от t . Остальные формы уже будут катастрофами:

1. Каспoidные катастрофы:
складка (A_2)

$$u_1^3 + t_1 u_1 + (M);$$

сборка (A_3)

$$\pm (u_1^4 + t_2 u_2^2 + t_1 u_1) + (M);$$

ласточкин хвост (A_4)

$$u_1^5 + t_3 u_1^3 + t_2 u_2^2 + t_1 u_1 + (M);$$

бабочка (A_5)

$$\pm (u_1^6 + t_4 u_1^4 + t_3 u_1^3 + t_2 u_2^2 + t_1 u_1) + (M);$$

вигвам (A_6)

$$u_1^7 + t_5 u_1^5 + t_4 u_1^4 + t_3 u_1^3 + t_2 u_2^2 + t_1 u_1 + (M).$$

2. Омбилические катастрофы:

эллиптическая омбилика (D_4^-)

$$u_1^2 u_2 - u_2^3 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N);$$

гиперболическая омбилика (D_4^+)

$$u_1^2 u_2 + u_2^3 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N);$$

параболическая омбилика (D_5)

$$u_1^2 u_2 - u_2^4 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N);$$

вторая гиперболическая омбилика (D_6^+)

$$u_1^2 u_2 + u_2^5 + t_5 u_2^3 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N);$$

вторая эллиптическая омбилика (D_6^-)

$$u_1^2 u_2 - u_2^5 + t_5 u_2^3 + t_4 u_2^2 + t_3 u_1^2 + t_2 u_2 + t_1 u_1 + (N);$$

символическая омбилика (E^6)

$$\pm (u_1^3 + u_2^4 + t_5 u_1 u_2^2 + t_4 u_2^2 + t_5 u_1 u_2 + t_2 u_2 + t_1 u_1) + (N).$$

Здесь $(u_1 \dots u_n) \in IR^n$, $(t_1 \dots t_r) \in IR^r$; символ (M) обозначает морсовскую функцию вида

$$u_2^2 + \dots + u_i^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_n^2, \quad (1 \leq i \leq n),$$

а N — аналогично функцию вида

$$u_3^2 + \dots + u_i^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_n^2, \quad (2 \leq i \leq n).$$

7.6. Открытые системы

Для систем, обменивающихся энергией и веществом с окружающей средой, изменение энтропии за время dt можно разложить на следующие слагаемые:

$$dS = d_e S + d_i S, \quad (7.34)$$

где $d_e S$ — поток энтропии из окружающей среды; $d_i S$ — продукция энтропии вследствие необратимых процессов внутри системы. При этом второй закон термодинамики гласит, что для всех физических процессов

$$d_i S \geq 0, \quad (7.35)$$

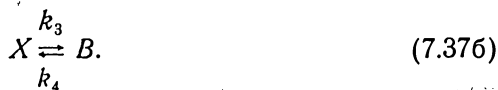
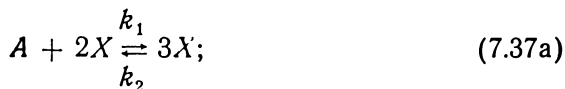
причем равенство относится только к равновесию. В приближении изолированной системы (энергия E постоянна) $d_e S = 0$ и (7.35) приобретает вид:

$$(dS)_E \geq 0, \quad (7.36)$$

т. е. энтропия изолированной системы необратимо возрастает. Эволюция в этом случае [96] направлена к непрерывной дезорганизации, или к деструкции структур, введенных начальными условиями. Необратимость в термодинамике выражает статистический закон эволюции к «наиболее вероятному» состоянию, соответствующему состоянию максимального беспорядка.

Такая трактовка второго закона термодинамики приводит к утверждению, что некая идеальная структура возникла в незапамятные времена, а с тех пор порядок аннигилируется в прогрессирующий хаос, соответствующий «наиболее вероятному состоянию». Биологическая же эволюция указывает на точно противоположное направление. Биологи в настоящее время отмечают, что второй закон все-таки приложим к системе в целом (к живой системе + окружение) и что он полностью совместим с уменьшением энтропии в организме. При этом сам Дарвин объяснял необратимую эволюцию к более организованным структурам через естественный отбор. Другими словами, вследствие того, что естественный отбор благоприятствует исключительно ситуациям, соответствующим некоторому виду «статистической флуктуации», эти исключения, т. е. организованные структуры, в конечном счете становятся правилом в биологии.

В книге [96] Николис и Пригожин рассматривают варианты химических реакций, в которых кинетические уравнения допускают более одного стационарного решения. В таких условиях происходят резкие переходы между устойчивыми стационарными состояниями (не сопровождающиеся возникновением временной упорядоченности). Представим себе модель простой автокаталитической реакции:



Полная реакция имеет вид $A \rightleftharpoons B$. Система открыта в смысле того, что она взаимодействует с бесконечными резервуарами ве-

ществ A и B (т. е. их концентрации постоянны), Реакция описывается кинетическим уравнением

$$\frac{dx}{dt} = -k_2 X^3 + k_1 A X^2 - k_3 X + k_4 B, \quad (7.38)$$

которое допускает равновесное решение, если выполнены условия для одновременного равновесия реакции (7.37):

$$k_1 A X_{eq}^2 = k_2 X_{eq}^3; \quad k_3 X_{eq} = k_4 B. \quad (7.39)$$

Если $k_i = \text{const}$, то (7.39) рассмотрим как

$$R_{eq} = \left(\frac{A}{B} \right)_{eq} = \frac{k_4 k_2}{k_1 k_3}. \quad (7.40)$$

Если $R \neq R_{eq}$, то (7.37) обращается в ноль, и система находится в неравновесных условиях. Стационарные решения уравнения (7.38) удовлетворяют уравнению

$$X_0^3 - a X_0^2 + k X_0 - b = 0, \quad (7.41)$$

где

$$a = \frac{k_1 A}{k_2}, \quad b = \frac{k_4 B}{k_2}, \quad k = \frac{k_3}{k_2}.$$

Из алгебры известно, что характер корней этого уравнения зависит от знака выражения $q^3 - r^2$,

$$g = -\frac{1}{9}a^2 + \frac{1}{3}k; \quad r = \frac{1}{27}a^3 - \frac{1}{6}ak + \frac{1}{2}b, \quad (7.42)$$

если $q^3 + r^2 > 0$, то существует один действительный и два комплексных сопряженных корня;

если $q^3 + r^2 < 0$, все три корня действительны. Эти режимы разделены в пространстве кривой

$$g^3 + r^2 = 0, \quad (7.43)$$

на которой уравнение (7.38) имеет по крайней мере два одинаковых корня

$$x_{0_1} = x_{0_2} = -r^{1/2} + \frac{a}{3}, \quad (7.44a)$$

а третий определяется равенством

$$x_{0_3} = 2r^{1/3} + \frac{a}{3}. \quad (7.44b)$$

На рис. 49 представлена диаграмма линейной устойчивости для приведенной реакции. Область, ограниченная кривой $b = b(a)$, т. е. $b_1 < b < b_2$ при $a = a_1$ соответствует множественным стационарным состояниям. Если $r = 0$ и $q = 0$, то все корни равны и

$$a = (3k)^{1/2}; \quad b = \frac{\sqrt{3}}{9}k^{3/2} = \frac{a^3}{27}.$$

Тогда (7.43) можно представить как

$$b^2 + 2 \left(\frac{2}{27} a^3 - \frac{1}{3} a k \right) b + \frac{4}{27} k^3 - \frac{1}{27} a^2 k^2 = 0, \quad (7.45)$$

Если обозначить два корня этого уравнения как b_1 и b_2 и $b_1 < b_2$, то для того, чтобы все три корня (7.41) были действительными, надо, чтобы $b_1 < b < b_2$. Условие равновесия (7.40), выраженное через a и b

$$\left(\frac{b}{a} \right)_{eg} = k,$$

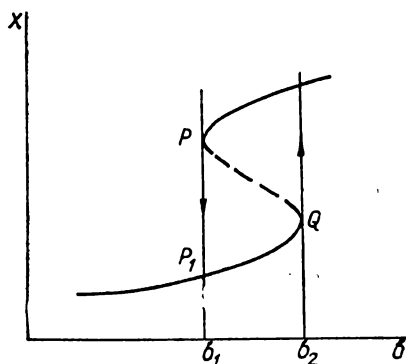


Рис. 49. Диаграмма линейной устойчивости химической реакции, кинетическое уравнение которой допускает более одного стационарного решения.

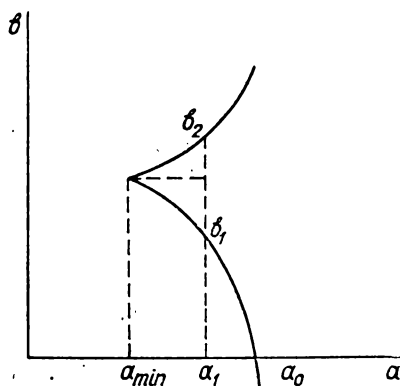


Рис. 50. Зависимость концентрации вещества x от параметра b .

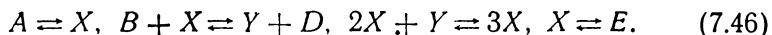
не выполняется, как легко убедиться, если справедливо $b_1 < b < b_2$, т. е. множественные стационарные состояния могут возникать лишь вдали от равновесия. На рис. 50 представлена зависимость параметра x от b . Возвращаясь к предыдущему разделу, читатель может узнать в кривых рис. 49 и 50 характерные черты проекций катастрофы сборки. Характерно, что и скачки между состояниями здесь подчиняются принципу «промедления» Тома, т. е. при изменении параметра b из состояний на ветви $P'Q$ могут происходить переходы на верхнюю ветвь (из точки Q) и даже прежде, чем будет достигнута эта точка, если на систему накладываются возмущения, превышающие значения, соответствующие промежутку PQ . Здесь авторы работы [96] уже «примешивают» к теории катастроф условия «сильного» или «достаточно сильного» возмущения.

Рассматривая снова уравнение (7.41), отметим, что кроме зависимости от параметра b , x зависит от отношения $k_3/k_2 = k$ и от a . Поэтому перейти от x нижней ветви к значениям x на верхней

ветви можно различными путями. Некоторые из них проходят через область гистерезиса. Отсюда следует, что термодинамическая ветвь, которую можно было бы определить как совокупность нижних значений x , является явно неустойчивой.

Теперь рассмотрим модель, позволяющую показать, как возникают в системе неравновесные упорядоченные структуры, сохранение которых требует непрерывного обмена энергией и веществом с внешним миром, т. е., по определению Пригожина, диссипативные структуры [106].

Представим себе такую схему реакций:



Это знаменитая модель «брусселятора» [96]. Здесь автокаталитическая стадия, включающая тримолекулярную реакцию, введена для добавления нелинейности, необходимого условия появления неустойчивости. Система открыта для A, B, C, D , которые поддерживаются постоянными во времени и пространстве. Если предположить, что все кинетические константы равны единице, то отклонение состояния системы (7.46) от равновесия задается отношениями концентраций A/E и B/D . Равновесие соответствует равенству

$$(A/E)_{eg} = (B/D)_{eg} = 1. \quad (4.47a)$$

Изучение системы сильно упрощается в предельном случае

$$D \rightarrow 0, \quad E \rightarrow 0. \quad (7.47b)$$

Это означает, что продукты D и E удаляются, как только они возникают. Средство соответствующих реакций стремится при этом к бесконечности, т. е. система пребывает на «бесконечном расстоянии» от равновесия. Для упрощения рассмотрения пренебрежем обратными реакциями в оставшихся двух стадиях (7.46). При этом схема становится совсем необратимой. Однако можно определить продолжение термодинамической ветви, которое задается просто однородным стационарным решением

$$X_0 = A, \quad Y_0 = B/A. \quad (7.48)$$

Для упрощения предположим, что система эволюционирует в единственном пространственном измерении r . Уравнения химической кинетики, соответствующие (7.46), имеют вид (в предельном случае идеальной смеси)

$$\begin{aligned} \partial X / \partial t &= A - (B + 1) X + X^2 Y + D_x (\partial^2 X / \partial r^2); \\ \partial Y / \partial t &= BX - X^2 Y + D_y (\partial^2 Y / \partial r^2), \end{aligned} \quad (7.49)$$

где D_x, D_y — коэффициенты диффузии x и y . Один из важнейших вопросов, касающихся поведения системы уравнений (7.49) вдали от равновесия, вопрос об устойчивости термодинамического реше-

ния. Для ответа на него исследуют поведение вокруг термодинамической ветви (7.49) любых возможных видов флуктуаций.

I. Предположим, что начальная флуктуация практически не зависит от пространственного положения. В этом случае можно изучить уравнения (7.49) после отбрасывания диффузионных членов. Тогда для

$$B > B_c, \quad B_c = A^2 + 1 \quad (7.50)$$

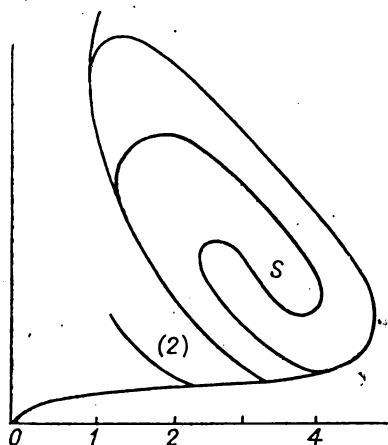


Рис. 51. Незатухающий периодический режим химической системы.

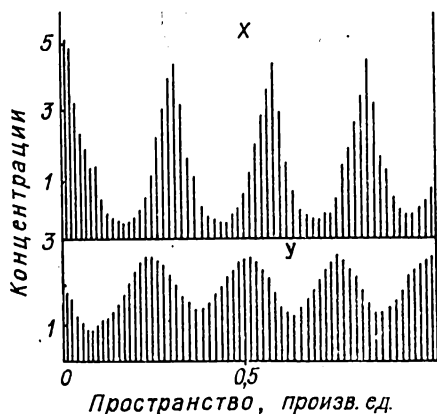


Рис. 52. Пространственная структура, возникшая в результате флуктуаций.

состояние (7.43) неустойчиво. Вслед за неустойчивостью система эволюционирует к незатухающему периодическому режиму (рис. 51). Важно, что этот режим достигается независимо от начальных условий. Его характеристики, например, период, амплитуда колебаний, являются, следовательно, внутренними свойствами системы и не зависят от начальных условий, т. е. здесь имеется предельный цикл (см. 7.3). Флуктуации выше неустойчивости ведут себя совершенно иначе, чем ниже или около нее. В последних случаях флуктуации либо затухают экспоненциально, либо (в лучшем случае) осциллируют около стационарного состояния, образуя затухающие колебания. Вдали же от равновесия и за пределами неустойчивости флуктуации усиливаются. Система покидает стационарное состояние и эволюционирует к определенной единственному образом траектории (как показано в нашем примере) или к дискретному множеству траекторий (в общем случае). Это когерентное поведение. Все эти случаи описываются в рамках теории аттракторов.

II. Допустим, что начальные флуктуации не постоянны в пространстве. Снова оказывается, что стационарное состояние (7.48) становится неустойчивым в области величин B выше некоторой критической величины B_c . На этот раз B_c зависит от A и от коэффициентов диффузии D_x, D_y . Для B немного выше B_c флуктуации с длиной волны около критической величины λ_c , зависящей от A ,

D_x , D_y , усиливаются, и система покидает состояние (7.48), После этого она стабилизируется в новом стационарном состоянии, которое теперь зависит от пространственных координат (рис. 52). Таким образом, получается пространственная структура, возникающая вслед за неустойчивостью, изменяющая свойства симметрии системы, так как последняя становится спонтанно неоднородной [106] неустойчивостью, нарушающей симметрию. Свойства этой структуры заметно отличаются от классического поведения равновесных структур. В частности, ее образование требует существования термодинамического порога, соответствующего минимальному уровню диссипации, т. е. диссипативная структура — гигантская флуктуация, стабилизированная потоком энергии, вещества и информации из внешнего мира. Интересно, что конфигурация, представленная на рис. 52, имеет энтропию, меньшую, чем постоянная стационарная энтропия, что обусловлено появлением пространственного порядка. В этом состоит проявление «порядка через флуктуации».

7.6.1. КОГЕРЕНТНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ПРИ СОРБЦИИ ИОНОМЕРАМИ

Исследование колебательных процессов в системах химических реакций большей частью было посвящено системам реакция + диффузия. Вместе с тем в случае полимеров здесь необходимо учитывать также и времена релаксации, поскольку они, в отличие от других веществ, часто сопоставимы со временем эксперимента. В. А. Любимовой и одним из авторов работы [107] исследована кинетика дифференциальной и интегральной сорбции паров толуола и тетрагидрофурана сополимерами стирола и акриловой кислоты с молярным содержанием 3,8% с различной степенью нейтрализации. Исследовались пленки толщиной ~ 100 мкм, которые получали испарением растворителя из 2%-го раствора в тетрагидрофуране при комнатной температуре с последующей сушкой до постоянного веса. Пленки отжигали при температуре 150°C в течение 4 ч при давлении 10^{-3} торр с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Сорбционные эксперименты проводились на весах Мак-Бена в высоковакуумной установке. На рис. 53 представлены кинетические кривые дифференциальной сорбции толуола иономерами с различной степенью нейтрализации. Наблюдаемое поведение кислотного образца (рис. 53, а) описывается в терминах спаренного механизма диффузии и релаксации. Характерно, что для сополимеров, содержащих солевые группы, при определенных концентрациях толуола и достаточно больших временах на кинетических кривых сорбции наблюдаются экстремумы: система приходит в равновесие, последовательно выбрасывая и поглощая растворитель в изобарно-изотермических условиях (рис. 53, в). Аномалии такого типа связывают с эффектом фазового разделения, особенности которого определяются двумя

конкурирующими релаксационными процессами: формированием (или разрушением) флуктуационной сетки солевых связей (с последующим изменением функциональности узлов сетки) и зародышеобразованием, ростом частиц новой фазы. Процесс фазового разделения фиксируется по помутнению пленок, наблюдаемому визуально. Пересыщение иономерных пленок растворителем, создающее предпосылки для последующего его выброса при фазо-

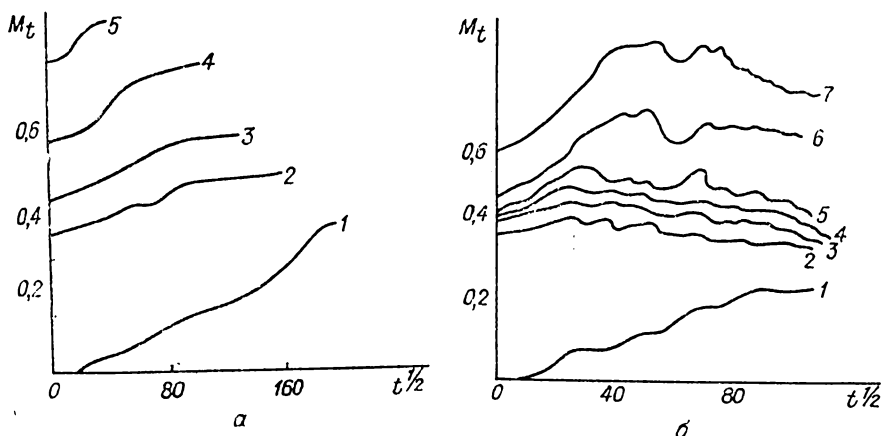


Рис. 53. Кривые кинетики дифференциальной сорбции толуола полимерами: *а* — образец не содержит солевых групп; *б* — содержит. Относительное давление паров толуола: 1 — 0—0,72; 2 — 0,72—0,75; 3 — 0,75—0,8; 4 — 0,8—0,83; 5 — 0,83—0,86; 6 — 0,86—0,9.

вом разделении (проникновение в область метастабильных состояний вдоль концентрационной оси), связано с эффектом спонтанного образования флуктуационной сетки и(или) с увеличением функциональности узлов с соответствующим смещением кривой фазового равновесия в координатах температура—состав. Степень пересыщения определяется временем релаксации второго из указанных выше релаксационных процессов, тогда как первый релаксационный процесс определяет период пульсации и время достижения сорбционного равновесия. Наблюдаемый рост концентрации растворителя в пленке, следующий за каждым актом его выброса, объясняется разрушением сетки солевых ассоциатов, приводящим к изменению положения системы относительно смещающейся фазовой диаграммы. Известно, что тетрагидрофуран сольватируется солевыми группами. Это препятствует образованию сетки солевых связей и, как видно из рис. 53, *б*, описанные выше когерентные временные процессы в этом растворителе отсутствуют.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ПРИНЦИПОВ ДИССИПАТИВНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ В БИОЛОГИЧЕСКИХ И ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Изучение принципов самоорганизации в разнообразных системах все больше приводит нас к предположению о том, что на большинстве уровней иерархии — от макромолекулы до биосферы — в целом законы, определяющие динамику существования систем, очень близки. Это в определенной степени обусловлено тем, что макромолекулы характеризуются «антиэнтропийностью», стремлением к образованию некоторых систем большей размерности.

Эволюция таких (подчиняющихся нелинейным законам химической кинетики) систем могла бы проходить через ряд неустойчивостей, возникающих вследствие флуктуаций определенных типов (стохастических элементов) с последующей детерминистической эволюцией (т. е. движение с повышением энтропии, соответствующим традиционной термодинамике) к новому типу режима [106]. По мнению авторов [106], аппаратом для описания указанных закономерностей является некоторый синтетический подход, основанный на взаимосвязи двух областей: теории флуктуаций и теории устойчивости систем (описываемых системами дифференциальных уравнений). Отметим, что флуктуации описываются как некий случайный процесс, «забрасывающий» систему в область устойчивости, например, в общем случае по Ляпунову [109]. Исходной точкой рассуждений в том подходе явилось доказательство [110] того, что энтропия в стационарном состоянии имеет минимум по отношению к вариациям обобщенных сил, совместимым с граничными условиями. Эта теорема минимума продукции энтропии свидетельствует, что последняя — неравновесная функция.

Свойство минимума обеспечивает устойчивость стационарного состояния (конечно, вдали от максимума энтропии). Критерий устойчивости системы вдали от термодинамического равновесия записывается в следующем виде [110]:

$$T\delta S = \sum_i \delta v_i \delta A_i \geq 0, \quad (8.1)$$

где δv_i и δA_i — соответствуют флуктуации химического сродства и скорости реакции; T — температура; δs — избыток продукции энтропии вследствие флуктуации.

Принципы подхода брюссельской школы во главе с Пригожиным к описанию процессов самоорганизации системы вдали от равновесия приведены нами в предыдущей главе. Вместе с тем там представлены более простые случаи, поддающиеся наглядному описанию. При описании же значительных по сложности систем,

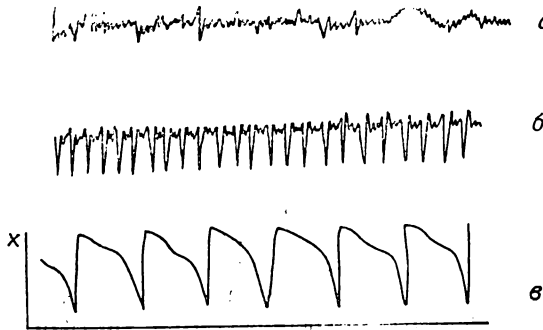


Рис. 54. Электроэнцефалограмма:

а — в процессе нормальной работы кортикальной нейронной сети; *б* — в случае эпилептического «захвата»; *в* — имитационный эксперимент на ЭВМ.

к которым относятся, несомненно, и биологические структуры, такой очевидности нет. Как подчеркивают Николис и Пригожин [96], большинство явлений самоорганизации — в основном образование пространственно-временных диссипативных структур — можно рассматривать как результат сопряжения между нелинейными осцилляторами. При выполнении определенных условий такое сопряжение, обусловленное диффузией, может привести к синхронизации различных осцилляторов, с поддержанием постоянных разностей фаз между ними даже в том случае, когда собственные периоды отдельных осцилляторов различны.

Отметим, что наличие различного типа осциллирующих состояний характерно для нейронов и нейронных сетей, называемых «реверберирующими». При этом все возбужденные состояния нейронов относятся к неравновесным. Это как бы «вдвойне» неравновесные состояния. Во-первых, все биологические структуры по самой своей сути находятся вдали от термодинамического равновесия, куда попадут после гибели; во-вторых, любая нестационарная, т. е. отличающаяся от некоторого исходного состояния, активность нейронов и нейронных сетей неравновесна по отношению к этому исходному состоянию. Естественно предположить, что нейроны и сети подчиняются закономерностям, близким к закономерностям, которым подчиняются диссипативные структуры. В работе

[111] представитель брюссельской школы Баблоянц прямо связывает принципы самоорганизации в многосвязных системах (они частично приведены в предыдущей главе) с принципами динамики активности нейронных сетей. Так, на рис. 54 приведена электроэнцефалограмма кортикальной нейронной сети (рис. 54, *а*) в процессе нормальной работы и в случае так называемого эпилептического «захвата» (рис. 54, *б*). Если в нормальном случае практически не наблюдается корреляции между индивидуальными нейронами в сети, то при «захвате» активность всех нейронов как бы синхронизирована, причем это приводит к резкому увеличению амплитуды нервных импульсов.

Модель данного процесса основана на описании сети, сформированной из $2N$ возбуждающих и тормозящих нейронов (поровну нейронов каждого типа). Переменные представлены набором мембранных потенциалов возбуждающих и тормозящих нейронов. Временные характеристики такой системы представлены уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{dx_j(t)}{dt} = & K[V - x_i(t)] + [\varepsilon - x_i(t)] \sum_{j=1}^N a_{ij} f[x_i(t - \tau)] + \\ & + [E_{cj} - x_i(t)] \sum_{j=1}^N b_{ij} b[y_i(t - \tau)]; \\ \frac{dy_j(t)}{dt} = & k[V - y_j(t)] + [\varepsilon - y_i(t)] \sum_{j=1}^N C_{ij} f[x_i(t - \tau)], i = 1 \dots N. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Отметим, что скорость импульсации играет здесь роль связывающего много ячеек оператора, ответственного за нелинейность всего ансамбля.

Предполагая, что входные значения сигналов, поступающих на вход данного нейрона, постоянны, получаем следующие выражения:

$$\sum_{j=1}^N a_{ij} = A; \quad \sum_{j=1}^N b_{ij} = B; \quad \sum_{j=1}^N C_{ij} = C, \quad i = 1 \dots N.$$

В результате решения уравнений (8.2) с учетом приведенных выше выражений получим следующий результат: малые значения возбуждающих сигналов A приводят к решению, имеющему всего одно стационарное состояние с малыми x и y . Увеличение возбуждающих сигналов до критического значения A обуславливает появление множественных устойчивых состояний со значительными амплитудами x и y . Анализируя стабильность системы, видим, что для критических значений $A = A^*$ верхняя ветвь может стать нестабильной и система претерпевает бифуркацию в периодическое стабильное решение. На рис. 54, *в* показаны результаты проведенного автором работы [111] имитационного эксперимента по описанию данной системы на ЭВМ. Данное предположение в до-

статочной мере подтверждается, и соответственно динамика нейронных ансамблей может быть описана в терминах теории бифуркаций.

Отметим тот факт, что Баблянец уже не считает, как авторы работы [96] Николис и Пригожин, наличие диффузии обязательным условием самоорганизации системы. Описание теперь уже идет на уровне сигналов, т. е. переходит на язык кибернетики. Итак, периодически стабильную импульсацию нейронных ансамблей уже можно рассматривать в терминах неравновесной термодинамики, или неравновесной теории динамических систем. Кроме того [96], нелинейные осцилляторы, являющиеся как бы «сигнальным портретом» диссипативных структур, обладают способностью генерировать отдельные импульсы при внешнем стимулировании. Это позволяет использовать такой подход и в случае асинхронного поведения нейронных ансамблей. Ниже авторы позволяют себе некоторое отвлечение от конкретного рассмотрения в область, которую можно было бы назвать методологией науки, с целью показать, что моделирование нейронных ансамблей на самых различных уровнях является, наряду со своим прямым предназначением (получением некоторых конкретных закономерностей для биологии и нейрокибернетики), методом для описания большинства диссипативных структур.

До начала XX в. в физике бытовал детерминистический подход, в котором постулировалось, что каждое явление вызывается определенными легко измеряемыми причинами. Как пишет Ивахненко [47]: «Детерминированная математическая модель должна дать возможность на основании точного измерения входных величин осуществить расчет значений выходной величины. С позиций детерминизма можно, например, рассчитать, на какую сторону упадет подброшенная вверх монета, для этого достаточно точно измерить все условия ее старта и воздействия при полете в атмосфере». Казалось бы, возникший позднее статистический подход, квантовая механика и другие науки, опирающиеся на вероятностное представление, серьезно поколебали позиции детерминизма. Действительно [47], вероятностный подход снял необходимость измерения трудно доступных, часто неуловимых величин. Он провозгласил принцип неизмеримости бесконечного числа малых и больших воздействий. В этом он противоположен детерминированному подходу. Однако с методологической точки зрения оба подхода близки между собой, поскольку базируются на анализе причин и следствий, входов и выходов. Их сближает общий дедуктивный способ мышления исследователя. На основании изучения характеристик входов некоторая заранее предполагаемая модель указывает характеристики выходов.

Различие состоит только в том, что при детерминизме характеристиками являются значения единичных отклонений, а при вероятностном рассмотрении — их средние значения. Учитывая общий дедуктивный характер детерминированного и вероятностного подходов, автор работы [47] называет их детерминистическими

и противопоставляет им подход, связанный с самоорганизацией моделей на ЭВМ. Здесь роль человека сводится к организации перебора моделей на ЭВМ. Особо преимущества такого подхода проявляются в случае анализа сложных систем, состоящих из элементов, свойства которых не складываются аддитивно, а дают синергические эффекты. Несомненно, что к таким системам относятся и ансамбли диссипативных структур как с пространственной, так и с временной организацией.

8.1. Модели нейронов

К сожалению, исследователи, моделирующие нейроны, как правило, обращали внимание на отдельные их свойства: либо суммирование входных сигналов, либо взаимосвязь между тормозящими и возбуждающими воздействиями, либо реализация на нейроноподобных элементах функций логики и т. п. При этом часто не учитывали стохастические свойства нейронных ансамблей. В работе [112] отмечается, что попытки применить для описания нейронных сетей аппарат двухзначной математической логики явно не адекватны сложности переработки информации в нейронах. Так же недостаточны попытки описания нейрона как чисто аналогового элемента. Взамен предлагается подход, основанный на использовании так называемой бесконечнозначной, или непрерывной логики, которая может быть названа *нейронной логикой*. В практике моделирования достаточно устойчиво сложилось представление о нейроноподобном элементе как устройстве, имеющем множество возбуждающих и тормозящих входов (рис. 55) с весовыми коэффициентами S_i (определяющими вклад каждого синапса в общую активность нейрона, принимающими значения $A < S_i < B$), и один выход. Входные x и выходные y сигналы изменяются в пределах $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ (т. е. могут быть нормированы до этих величин). Эти значения x и y моделируют сигналы нейронов — частоту следования импульсов — и не изменяют своего знака. Обычно принимают, что результирующая функция нейроноподобного элемента определяется выражением

$$y = \begin{cases} 1, & \text{если } \left(\sum_1^N S'_i x'_i - \sum_1^m S''_j x''_j \right) \geq P; \\ \alpha \left[\sum_1^n S'_i x'_i - \sum_1^m S''_j x''_j \right], & Q < \left(\sum_1^n S'_i x'_i - \sum_1^m S''_j x''_j \right) < P; \\ 0, & \text{если } \left(\sum_1^n S'_i x'_i - \sum_1^m S''_j x''_j \right) < Q, \end{cases} \quad (8.3)$$

где S'_i , S''_j — соответственно весовые коэффициенты возбуждающих и тормозящих входов; x'_i , x''_j — входные сигналы соответ-

ственно возбуждающих и тормозящих входов; α — нормирующий коэффициент; P и Q — соответственно верхний и нижний пороги внутреннего состояния нейроноподобного элемента.

В качестве примера конкретной реализации такого рода нейроноподобного элемента можно представить схему на рис. 56. Элемент содержит [113] источники входных импульсов 1, сумматор 2, выход которого через последовательно соединенные схему сравнения 3 и преобразователь 4 напряжения в частоту подклю-

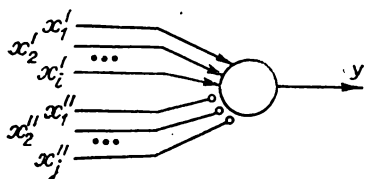


Рис. 55. Функциональная схема нейроноподобного элемента.

чен к блоку 5 формирователя выходных импульсов, преобразователи 6 частоты в напряжение, содержащие последовательно соединенные мультивибратор 7, интегратор 8 и согласующий элемент 9, возбуждающий и тормозящий входы 10, 11. На вход преобразователя 6 поступает последовательность входных импульсов с частотой. Муль-

тивибратор 7 стандартизирует входные импульсы по форме, длительности, амплитуде, после чего происходит преобразование частоты входных импульсов в напряжение в интеграторе 8, которое через согласующий элемент 9 поступает на сумматор 2.

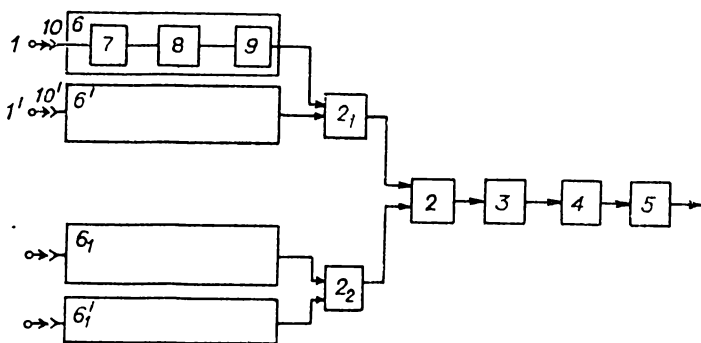


Рис. 56. Структурная схема исходной модели нейрона.

В качестве согласующих элементов 9 используются истоковые повторители на полевых транзисторах. В схеме предусмотрена регулировка влияния каждого из входов на выходное напряжение сумматора. В сумматоре 2 происходят вычитание возбуждающего и тормозящего напряжений и усиление разностного напряжения. Выходное напряжение сумматора 2 через схему сравнения 3 управляет частотой преобразователя 4, представляющего собой управляемый автоколебательный мультивибратор. Схема сравнения 3 содержит источник опорного напряжения, задающий нижний порог возбуждения. С момента равенства опорного напряжения и напряжения на выходе сумматора 2 оно последнее подается на преобразователь 4. Затем импульсы с частотой, пропорциональной

напряжению управления, поступают на блок 5 формирователя выходных импульсов.

Впервые модель нейроноподобного элемента, основанная на переходах между состояниями жидкого кристалла, была предложена авторами работы [114]. Такой подход наиболее близок к реальному нейрону, поскольку последний содержит в себе жидкие кристаллы: мезоморфные фосфолипиды и фосфолиппротеиды. Устройство включает (рис. 57) n входных резисторов 1, суммирующий конденсатор 2, токоразрядный резистор 3, фотодиоды 4—6, источник света 7, состоящий из источника напряжения 8 и светодиода 9, первый источник напряжения 10, жидкокристаллическую ячейку 11, делитель напряжения на резисторах 12 и 23, второй и третий 14, 15 источники напряжения, делитель напряжения на резисторах 16, 17. В исходном состоянии жидкокристаллическая ячейка 11 прозрачна и световой поток от светодиода 9 попадает на фотодиоды 4—6, при этом их сопротивление мало.

В это время на резисторе 3 падает определенное напряжение за счет тока, протекающего через фотодиод 4 от источника напряжения 10. Значения резисторов 12, 13, 16, 17 и напряжения источников 14, 15 выбирают таким образом, что в исходном состоянии на резисторах 13 и 16 напряжения противоположной полярности имеют одинаковое значение и компенсируют друг друга. При этом напряжение на выходах устройства, являющихся средними точками делителей напряжения, равно нулю. Когда на входах устройства появляются входные импульсы (возбуждающие — положительной полярности, тормозящие — отрицательной), алгебраическая сумма напряжений на конденсаторе 2, возникающая за счет входных сигналов, будет

$$v + v_0 = v_1 \geq v_{ж}, \quad (8.4)$$

где $v_{ж}$ — напряжение, при котором жидкокристаллическая ячейка резко теряет прозрачность вследствие фазового перехода. При этом на фотодиоды 4—6 не падает световой поток и сопротивление фотодиода 4 резко возрастает. Теперь на конденсаторе 2 остается только напряжение v . Поскольку же $v < v_{ж}$, происходит восстановление прозрачности жидкокристаллического содержимого ячейки 11. Однако прозрачность индикатора 11 восстанавливается через некоторое время после того, как уровень напряжения станет ниже $v_{ж}$, причем это время определяет длительность сформированного

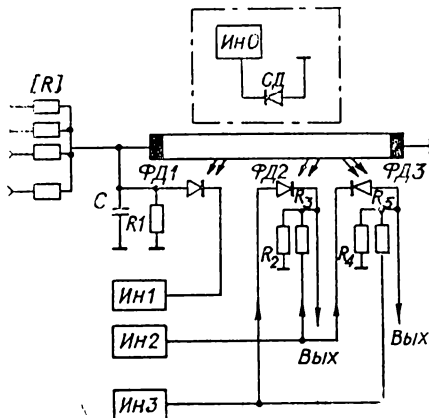


Рис. 57. Модель нейрона на базе жидкого кристалла.

импульса, а также рефракторность устройства (период, в течение которого нейрон не воспринимает входные сигналы).

Фотодиод 6, резисторы 12, 13 и фотодиод 5, резисторы 16, 17 служат для формирования выходных соответственно возбуждающих и тормозящих импульсов. После помутнения жидкокристаллической ячейки 11, сопротивления фотодиодов 5 и 6 резко возрастают, и на выходах устройства возникают соответственно положительные и отрицательные потенциалы. С восстановлением

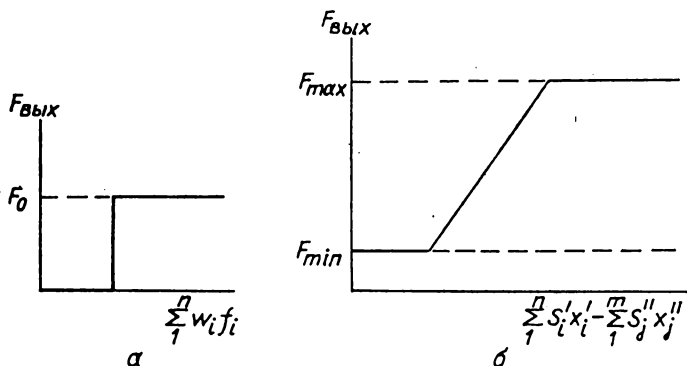


Рис. 58. Вход-выходные характеристики моделей нейрона:
а — модели (рис. 57); б — модели (рис. 56).

прозрачности формируется задний фронт выходных импульсов. После формирования выходного импульса устройство снова готово к реагированию на входные сигналы, и если алгебраическая сумма входных сигналов не уменьшилась и выполняется условие $v + v_0 \geq v_{ж}$, то происходит формирование нового импульса. Таким образом, устройство формирует импульсную последовательность в течение времени выполнения данного условия. На рис. 58 представлены характеристики описанных моделей.

Характерно, что модель на жидких кристаллах соответствует структурно-функциональному подходу Маккалока, одного из основателей теории моделирования нервных клеток [115], и отвечает пороговому принципу «все или ничего».

Отметим, что рассмотрение динамики нейроноподобных моделей используется как инструмент, описывающий дискретные свойства ансамблей диссипативных структур. Общность такого подхода иллюстрирует изображенная на рис. 59 схема, на которой в порядке возрастания сложности снизу вверх показаны основные типы диссипативных ансамблей. Ниже мы покажем, что практически все уровни этой иерархии можно имитационно смоделировать на базе представления о нейроноподобном элементе. Так, следующий этап моделирования — описание динамики нейронных сетей, состоящих из n элементарных ячеек (нейронов). Вначале приведем рассуждения Кирвелиса и Позина [112], в которых предпола-

гается обоснование существования некоторой особой логики, называемой авторами *нейронной логикой* (табл. 3).

Эти во многом недостаточно строгие постулаты мы привели, чтобы показать, что достаточно простые сети из двух или трех нейроноподобных элементов уже позволяют реализовать весь базис постулируемых функций этой логики. Так, функция «модуль разности» моделируется на схеме из трех нейронов (рис. 60, а). На выходе этой схемы имеется модуль разности двух величин:

$$y = |x_1 - x_2|. \quad (8.5)$$

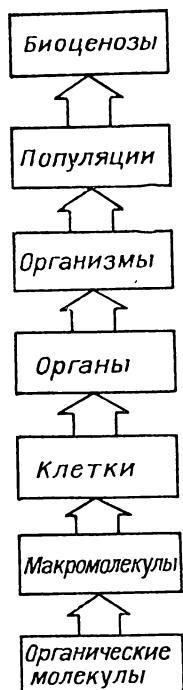


Рис. 59. Диссипативные ансамбли.

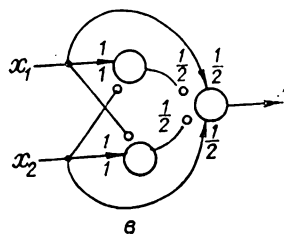
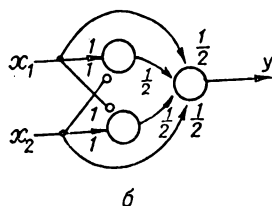
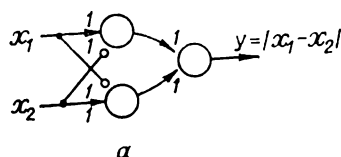


Рис. 60. Простые схемы нейроноподобных элементов для реализации логических функций.

Как свидетельствуют результаты анализа, алгебраическая запись этой функции

$$|x_1 - x_2| = |(x_1 - x_2) - (x_2 - x_1)| \quad (8.6)$$

не поддается дальнейшей минимизации. Эту функцию наделяют специальным обозначением:

$$y = \text{mod}(x_1, x_2).$$

А вот как производится реализация функции «выбор максимальной величины» (рис. 60, б), алгебраическая запись которой осуществляется функцией

$$\max(x_1, x_2) = \frac{1}{2}[(x_1 + x_2) + |x_1 - x_2|]. \quad (8.7)$$

Логическую операцию выбора наименьшей из двух величин x_1 и x_2 , обозначаемую $y = \min(x_1, x_2)$, также реализуют на сети из трех нейронов (рис. 60, в). Ее алгебраическая запись

$$\min(x_1, x_2) = \frac{1}{2}[(x_1 + x_2) - |x_1 - x_2|], \quad (8.8)$$

Читателей, интересующихся реализацией функций этой нестандартной логики, мы отсылаем к работе [112]. Отметим, что общность моделирования процессов морфогенеза, периодических реакций и динамики нейронных сетей подчеркивает Барто [117]. Он пишет, что общее свойство таких систем заключается в том, что они включают в себя сети взаимодействующих компонентов, обладающие некоторой структурной симметрией и линейностью, дающими возможность проводить над ними операцию свертки.

8.2. Устойчивость временных диссипативных состояний нейронных ансамблей

Если ранее мы исследовали выполнение нейронными ансамблями операций дискретных и логических, то теперь рассмотрим одну из не менее важных особенностей такого рода систем: образование ими набора устойчивых неравновесных состояний, часто связанных с так называемой «реверберацией» сигналов в сети.

В работе [118] достаточно строго рассмотрена проблема устойчивости такого рода состояний. Здесь описана структура, представляющая собой замкнутую цепочку из n нейронов. Для исследования ее устойчивости вначале определены локализация и взаимное расположение характеристических чисел матрицы связи данной нейронной сети. На втором этапе выясняется, как плоскость характеристических чисел преобразуется в соответствии с алгоритмом отдельного нейрона в плоскость корней p уравнений системы. Авторы показывают, что в принципе в нейронной сети может существовать четыре возможных вида временных состояний: неустойчивые колебания, устойчивые затухающие колебания, устойчивая апериодика, неустойчивая апериодика. На рис. 61 показана зависимость между типами доминирующих характеристических корней и видами временных состояний в циклических структурах.

Как видим, параметр λ — характеристическое число, оказывающее определяющее воздействие на переходы между состояниями

ми в системе. Так как для четного контура λ_{\max} — действительное число, то при малых его значениях система имеет устойчивую апериодиду (зона 4).

По мере увеличения λ_{\max} система переходит в зону устойчивых затухающих колебаний (зона 3) и при $\lambda_{\max} \geq 1 + \delta$ переходит границу устойчивости и попадает в зону неустойчивых колебаний (зона 2). В случае дальнейшего увеличения структурного параметра λ_{\max} система может перейти в зону неустойчивой апериодиды (зона 1).

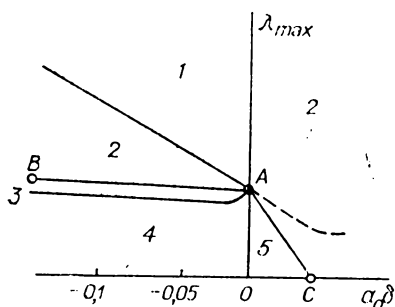


Рис. 61. Зависимость между типами характеристических корней и видами временных состояний в циклических структурах.

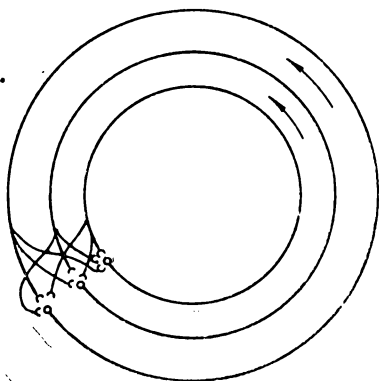


Рис. 62. Циклическая цепь из параллельных нейронов.

дики (зона 1). В случае отрицательного контура λ_{\max} всегда комплексно, поэтому выше границы устойчивости (в обеих зонах 1 и 2) система будет иметь неустойчивые колебательные процессы.

Конечно, нас интересуют незатухающие колебательные процессы, которые могут служить некоторыми точками отсчета для систем более высокого уровня организации. В этой связи интересно перейти от абстрактного рассмотрения, как в работе [118], к конкретному: а что же будет в самом деле с ревербирующим контуром? На первый взгляд очевидно, что через некоторый период времени ревербирующие колебания должны были бы затухать вследствие того, что происходит накопление погрешностей. Для внесения ясности в этот вопрос обратимся к наглядному рассмотрению нервных (нейронных) «петель», выполненному Беллом и Хантером [119].

Определим, что в сети могут существовать два типа погрешностей: тип А — присутствие нервных импульсов на выходе одного из нейронов при отсутствии импульса на его входе; тип Б — отсутствие нервного импульса на выходе одного из нейронов, на вход которого поступил нервный импульс.

Если нейронная сеть представлена информационным каналом для передачи двоичной информации, описываемым матрицей перехода

$$A = \begin{pmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

(p — погрешность типа А, q — типа Б), то после ряда итераций, приводящих к n петлям, этот канал будет определяться выражением

$$A^n = \begin{pmatrix} 1-p & p \\ Q & 1-Q \end{pmatrix};$$

$$P = p[1 - (1 - \epsilon^n)]/\epsilon, \quad Q = q[1 - (1 - \epsilon^n)]/\epsilon, \quad \epsilon = p + q. \quad (8.10)$$

В случае длины сети порядка 10 см и скорости распространения порядка 10 м/с (вполне соответствующих реальным величинам), количество циркуляций за 1 с будет $n=100$. Предполагая, что существует 1% погрешности в каждом направлении, имеем $p=q=0,01$; $\epsilon=0,02$. Общий уровень погрешности после этого количества циклов порядка

$$p = Q = 0,434 = 43\%.$$

Это, несомненно, слишком высокий уровень погрешности для одноканальной системы, чтобы реверберация сохранилась какое-то значимое время, а значит, запоминание в этой циклической структуре невозможно. Для того чтобы получить общий уровень погрешности в сети, после прохождения 100 циркуляций порядка

$$P = Q = 1\%$$

требовалось бы невозможно низкое значение погрешности в каждом нейроне: порядка $p=q=0,0001\%$.

С помощью несложных расчетов с применением теории информации легко убедиться, что даже проведение на каждом сотом цикле реверберации коррекции погрешности не очень помогает. Здесь можно применить так называемую периодическую коррекцию по большинству (ПКБ), предполагающую, что в одной циклической сети участвуют параллельно несколько независимых цепочек из нейронов, на одном конце связанных общими связями выход—вход (рис. 62).

Для такой сети, состоящей из трех цепочек, и при осуществлении ПКБ погрешности, возникшей в одной из них, за счет двух других вероятность погрешности будет: соответственно для погрешности типа А и Б

для одного цикла

$$\bar{p} = p^2(3 - 2p); \quad \bar{q} = q^2(3 - 2q);$$

для n циклов соответственно

$$P = \bar{p} \frac{1 - (1 - \bar{\varepsilon})^n}{\bar{\varepsilon}}; \quad Q = \bar{q} \frac{1 - (1 - \bar{\varepsilon})^n}{\bar{\varepsilon}},$$

где
$$\bar{\varepsilon} = \bar{p} + \bar{q} = p^2(3 - 2p) + q^2(3 - 2q).$$

Для случая $n=100$, $p=q=0,01$ получаем $\bar{p}=\bar{q}=0,000298$ и $P=Q=0,0289$, что несомненно значительно больше, чем в случае без ПКБ.

При $n \rightarrow \infty$ приведенные выше уравнения аппроксимируются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \bar{P} &\simeq \frac{p^2}{p^2 + q^2} \left[1 - e^{-3(p^2 + q^2)n} \right], \\ \bar{Q} &\simeq \frac{q^2}{p^2 + q^2} \left[1 - e^{-3(p^2 + q^2)n} \right]; \end{aligned}$$

для небольших $n\bar{\varepsilon}$

$$\bar{p} \simeq np \simeq 3np^2; \quad \bar{q} \simeq 3nq^2.$$

В итоге для большого числа каналов с $p=q$ малыми получим значения вероятностей погрешностей суммарного канала:

$$P = p \frac{1 - (1 - \varepsilon)^n}{\varepsilon}, \quad Q = q \frac{1 - (1 - \varepsilon)^n}{\varepsilon}, \quad (8.11)$$

$$\varepsilon = p + q$$

где M — количество параллельных каналов. Так, для $M=21$ и $p=q=0,01$ и 100 циклов:

$$\bar{p} = \bar{q} = 352716 \times 10^{-22} = 3,5 \times 10^{-17} \text{ и}$$

$$\bar{P} = \bar{Q} = np = 3,5 \times 10^{-15}.$$

Таков уровень погрешностей всего ревербирующего канала.

На основании формул типа (8.11), по-видимому, можно выявлять наиболее оптимальную степень распараллеливания сигналов в циклической «запоминающей» системе из нейроноподобных элементов.

Кроме того, реальное существование устойчивых временных циклических диссипативных состояний достаточно обосновано. Интересно также, что такого типа необходимостью «коррекции большинством» можно теперь объяснить наличие многих сотен параллельных нейронных волокон, сходящихся к одному аксону и т. п.

8.3. Диссипативные структуры в динамике популяций

Возвращаясь к рис. 59, представляющему иерархию диссипативных структур, покажем теперь, что и динамика одного из верхних уровней этого рода структур — уровня популяций животных — подчиняется таким же закономерностям, как и структуры нижних уровней. На рис. 63 [120] показана зависимость между

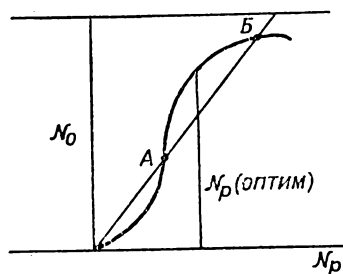


Рис. 63. Зависимость между величиной прироста и размером основного стада.

величинами родительского поколения N_p и прироста потомков в зависимости от численности популяции. Интересно, что по мере увеличения N_p (размеры основного стада) [121] от нулевого уровня до известной (оптимальной) величины темпы абсолютного прироста вначале возрастают. Однако, когда N_p переходит за «оптимальное» значение, отношение N_0/N_p падает вследствие усиливающейся внутрипопуляционной конкуренции и включения специфических «тормозных» механизмов.

Решающее значение имеет положение кривой популяции по отношению к линии, идущей под углом 45° из нулевой точки диаграммы. Она пересекает кривую в двух точках — A и B , являющихся критическими. На обоих отрезках кривой, лежащей ниже линии 45° , прирост популяции падает до нуля или становится отрицательным. На нижнем отрезке (ниже A) это объясняется слишком разреженной плотностью населения, не обеспечивающей размножения, и одновременно усиленной смертностью вследствие разрушения внутрипопуляционных структур. Выше точки B плодovitость также снижается (тормозные явления) и возрастает смертность из-за роста конкуренции и обострения межвидовых отношений (усиление хищничества и рост заболеваний). Характерно, что в точке A существует неустойчивое равновесие, поскольку популяция, величиной немного более A , быстро увеличивается, тогда как популяция, меньшая A , будет прогрессивно уменьшаться из-за превышения гибели над размножением. Последнее объясняет быстрое вымирание животных, наблюдающееся при снижении численности ниже критического порога A . Напротив, в точке B равновесие является саморегулируемым, так как значения популяции и больше B и меньше B стремятся к равновесному состоянию B . У разных популяций могут отличаться и наклон кривой и положение «зон равновесия», но общий тип сохраняется, т. е. такого рода зависимость имеет общий характер. Интересно, что размер зоны устойчивости (между A и B) свидетельствует о степени стойкости популяции и ее способности существовать без пополнения

извне. Масштаб оси ординат указывает на диапазон колебаний численности, а абсцисс — на колебания плодовитости.

Для демонстрации общности динамических свойств популяций и нейронных ансамблей нами проведено имитационное моделирование процессов изменения характеристик популяций с применением в качестве элемента системы модели нейроноподобного элемента [121—122].

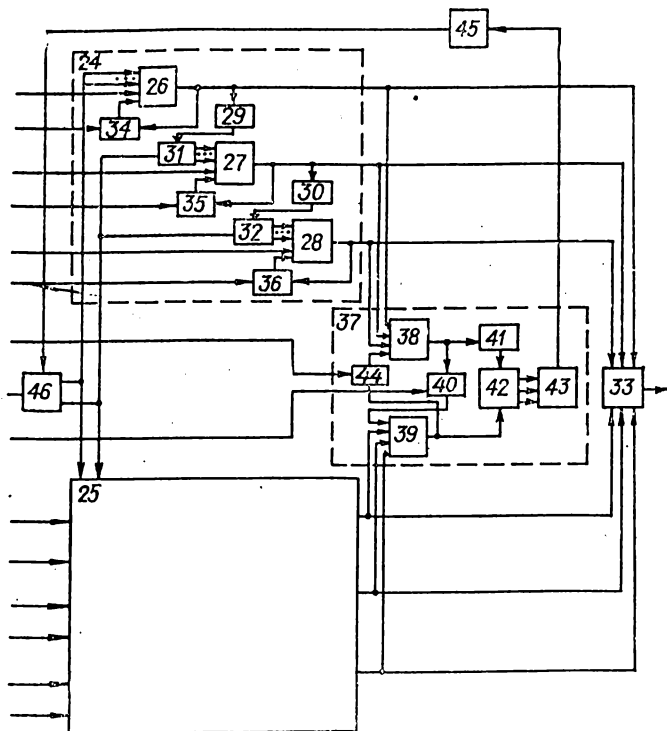


Рис. 64. Структурная схема устройства для моделирования динамики популяции.

В этих моделях приняты во внимание такие факторы, как возрастное распределение популяции с учетом соответствующего распределения уровня питания, плодовитости, сезонной половой активности обоих полов популяции, реакции системы на периодические и случайные воздействия. Устройство [122] работает следующим образом (рис. 64). На вторую группу входов нейронных элементов первой и второй групп поступают последовательности импульсов, моделирующие исходное количество животных соответствующих возрастных групп (нейронные элементы 3—5) и популяции самок (первая группа нейронных элементов). При этом первые нейронные элементы 3 моделируют младшую возрастную группу, а последующие элементы 4 и 5 соответствующие старшие возрастные группы.

Если одновременно на вход коммутатора 23 поступает управляющий сигнал, превышающий порог, отвечающий высокому уровню питания, то информативный сигнал через коммутатор 23 поступает на входы с максимальным заданным весом. При более низких управляющих сигналах информативный сигнал поступает на входы с меньшими весами. С выхода коммутатора 23 управляющий сигнал поступает на входы коммутаторов 8 и 9, на входы которых информативные сигналы поступают соответственно с выходов элементов 3 и 4. В зависимости от величины управляющего сигнала в коммутаторах 8 и 9 открывается доступ на входы элементов 4 и 5 с соответствующими заданными весами. С выхода элемента 3 импульсная последовательность через блок задержки 6, моделирующий временной интервал перехода из первой возрастной группы во вторую, поступает на информационный вход коммутатора 8, с выхода которого — на соответствующий вход элемента 4. При заданной максимальной величине управляющего сигнала импульсная последовательность с выхода элемента 3 переходит на вход элемента 4, вес которого равен 1, что соответствует полному выживанию особей в первой возрастной группе. Более детальные описания работы устройства для моделирования активности популяций на базе нейроноподобных элементов читатель может найти в работе [122]. Отметим только, что принцип построения такого устройства совершенно аналогичен построению моделей нейронных сетей или моделей биоценозов, т. е. как более низких, так и более высоких уровней диссипативных структур.

В заключение рассмотрим механизмы эволюционных преобразований популяций, поскольку они также описываются аналогичными зависимостями и подчиняются одним и тем же законам на самых различных уровнях развития диссипативных структур — от эволюции макромолекул до эволюции биоценозов. Исходя из представлений Шмальгаузена [123], последовательность эволюционных преобразований популяций состоит из следующих этапов.

1. Борьба за существование внутри биоценоза. Воздействие биоценоза на популяцию путем прямого и косвенного истребления ее особей (входной канал связи). Здесь подчеркивается воздействие системы, или, как мы привыкли писать, диссипативной структуры высшего уровня, на свои подсистемы. Под прямым уничтожением (элиминацией) понимают действие абиотических факторов (внешних) — неблагоприятная погода, пожары, наводнения и другие катастрофические события — являющиеся непосредственной причиной гибели организмов, а также истребление хищниками и смертность от болезней.

Под косвенной элиминацией подразумевают действие факторов, ослабляющих организм и усиливающих прямую элиминацию.

2. Сравнительная оценка вариантов, т. е. фенотипов организмов, происходящая в течение всей жизни каждого организма и осуществляемая в ходе истребления и их дальнейшего размножения. При этом происходит естественный отбор фенотипов внутри популяции. Его результат — преобразование, а следовательно, и

изменение наследственной структуры популяции. Таким образом, естественный отбор — закономерное выражение сложной системы контроля в биоценозе. Он служит также механизмом преобразования обратной информации в биогеоценозе, осуществляемого через преимущественный отбор особей с адаптивными генотипами, что в конечном итоге приводит к перестройке наследственной информации в зародышевых клетках.

Эффективность естественного отбора зависит от количества средней информации. Представляется, что носителями информации могут быть только распределенные неравномерно мутантные гены. Количество информации, вносимое каждым таким геном, можно определить согласно [123] суммированием информации, вносимых всеми вариантами.

Получаемое при этом количество средней информации — показатель, отражающий распределение отдельных вариантов в популяции и потенциальные возможности их отбора. Количество средней информации — та мера материала, которой оперирует естественный отбор, и поэтому она может служить показателем возможной скорости отбора в зависимости от концентрации отбираемых вариантов. Но, конечно, скорость отбора зависит и от ряда других факторов, например, воздействия биоценоза и т. п.

3. Существуют две формы естественного отбора в популяции. Первая форма стабилизирующая — аналог отрицательной обратной связи, а вторая — движущая — аналог положительной обратной связи. В случае превалирования факторов искажения передачи наследственного материала (разного рода мутаций, возникающих чаще всего под влиянием внешних воздействий и положительной оценки фенотипов, возникающих из-за этих искажений генофонда) вторая форма отбора ведет к суммированию и нарастанию фенотипического эффекта в ряде поколений. Стабилизирующая же форма естественного отбора превалирует при отрицательной оценке новых фенотипов и их устранении (элиминации). Эта форма стабилизирует устойчивость онтогенезов, состав фенотипов и всей структуры популяции. Эти формы не исключают друг друга, а напротив, взаимодействуют между собой. Легко увидеть в представлении о взаимодействии этих двух форм принципы, высказанные Пригожиным и Николисом [106] (см. главу 7), согласно которым установление стабильных состояний диссипативных структур вдали от равновесия происходит в результате первоначальной флуктуации параметров системы (аналог — мутации гена) с дальнейшей ее стабилизацией за счет взаимодействия с потоками энергии, массы из внешней среды (аналог — взаимодействие с биоценозом).

Отметим, что изложенные выше принципы использовали Эйген и Шустер [21] при описании естественного отбора на молекулярном уровне. Правда, они предложили в качестве исходных свойств, необходимых для самоорганизации молекулярных систем, дополнительно свойство метаболизма, мотивируя это следующим образом. Образование и разложение молекулярных видов должно

быть независимо друг от друга и спонтанно, т. е. их движущей силой должно быть положительное сродство. Этого невозможно достичь в равновесной системе, где оба процесса взаимосвязаны микроскопической обратимостью, приводящей к устойчивому распределению всех конкурентов, присутствующих в системе. Сложность, т. е. наличие громадного числа альтернативных структур в сочетании с пространственно-временными ограничениями, просто не допускает такого уравнивания и требует постоянного разрушения и образования новых структур. Отбор может действовать только на промежуточные состояния, которые образуются из высокоэнергетических предшественников и разрушаются, превращаясь в низкоэнергетические отходы. Способность системы использовать необходимые для этой цели свободную энергию и вещества называется метаболизмом. Остальные два свойства (самовоспроизведение и мутабельность), приводимые в работе [21], аналогичны принципам Шмальгаузена [123]. Интересна также аналогия между фенотипом, который по [123] является необходимым движущим звеном эволюции и «молекулярным квазивидом».

ПРЕДПОСЫЛКИ КИБЕРНЕТИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Как правило, в настоящее время у нас в стране принято называть кибернетическими все работы, связанные в той или иной мере с использованием ЭВМ. По аналогии, кибернетической технологией называют соответственно участки технологического процесса (ТП), в которых применяют вычислительную технику. К сожалению, «современная научная литература по кибернетике представляет собой огромный поток формальных математических работ, все более углубляющихся в специфику каждой из наук, которые, по идее Н. Винера, кибернетика должна была бы объединить» [124]. Эта фраза принадлежит А. Г. Ивахненко и написана им уже 15 лет назад, а сегодня в соответствии с диалектическими принципами этот однобокий крен соседствует с обратным движением — движением к обобщению, которое приводит к так называемой «общей теории систем». Последняя описывает явления и процессы с самых «неспецифических позиций». Таким образом, можно утверждать, что и сама кибернетика «претерпела бифуркацию», в которой одна ветвь представляет уход в углубленную специализацию, а вторая — в «гиперобобщение». По-видимому, такое происходит в той или иной степени и с другими научными направлениями. В диалектическом переплетении этих ветвей и осуществляется, наверное, эволюция наук.

Ниже мы попытаемся на уровне подхода общей теории систем описать принципы организации обобщенного технологического процесса. Отметим, что такой подход, являющийся, несомненно, достаточно теоретическим и абстрактным, тем не менее может, по мнению авторов, при некотором сужении общности служить основой для принятия более конкретных решений. Проблема создания такого рода модели технологического процесса, без сомнения, назрела, поскольку она должна послужить базой для создания объективных принципов оптимизации, в отличие от множества технико-экономических моделей, носящих часто достаточно субъективный характер.

9.1. Системное представление технологического процесса

Введем понятие системы, имея в виду, что «система определяется в терминах ее наблюдаемых (или измеряемых) свойств или, точнее говоря, в терминах взаимосвязей между этими свойствами, а не тем, что они на самом деле собой представляют» [125]. Это определение довольно типично для системного подхода, оперирующего проявлениями внутренних свойств объектов, а не самими их внутренними свойствами.

Определение 1. Системой называют отношение на непустых множествах [125]:

$$S \subset \times \{V_i : i \in I\}, \quad (9.1)$$

где X — символ декартова произведения; I — множество индексов. Множество V_i — объект системы. Если I конечно, то (9.1) записывается в виде

$$S \subset V_1 \times V_2 \times \dots \times V_n. \quad (9.2)$$

Определение 2. Пусть $I_x \subset I$ и $I_y \subset I$ образуют разбиение множества, т. е. $I_x \cap I_y = \emptyset$ и $I_x \cup I_y = I$. Тогда

в х о д н ы м объектом называют множество

$$X = \times \{V_i : i \in I_x\}; \quad (9.3a)$$

в ы х о д н ы м — множество

$$Y = \times \{V_i : i \in I_y\}. \quad (9.3б)$$

В этом случае система S определяется соотношением

$$S \subset X \times Y. \quad (9.3в)$$

В литературе такое соотношение иногда называют системой «вход—выход», или «черный ящик».

Определение 3. Пусть для данной системы S имеется произвольное множество C , а функция $R: (C+x) \rightarrow Y$ такова, что

$$(x, y) \in S \Leftrightarrow (\exists c) [R(c, x) = y], \quad (9.4)$$

тогда C — множество или объект глобальных состояний системы, а его элементы просто глобальные состояния ее, а функции R — глобальная реакция системы.

Это определение является одним из фундаментальных, используемых в теории систем и употребляемых ниже для описания технологического процесса.

Авторы работы [125] доказали следующую теорему: каждой системе соответствует глобальная реакция

$$R: C \times X \rightarrow Y. \quad (9.5)$$

Технологический процесс мы будем описывать в виде системы P , причем

$$R: C_p \times X_p \rightarrow Y_p, \quad (9.6a)$$

где X_p — множество наблюдаемых (измеряемых) характеристик входного объекта, т. е. того вещества (материала, изделия и т. п.), которое будет подвергаться технологическому процессу; Y_p — множество наблюдаемых (измеряемых) характеристик выходного объекта (вещества, материала, изделия и т. п.), т. е. продукта, получаемого в результате технологического процесса; R — множество реакций системы, определяемое выражением

$$(x_p, y_p) \in P \Leftrightarrow (\exists C_p) [R(C_p, x_p) = y_p], \quad (9.6b)$$

C_p — множество глобальных состояний ТП как системы. Мы определим C_p как множество состояний, в которых входной объект может существовать во время ТП.

Для дальнейшего изложения введем также следующие определения:

Определение 4. Объект начальных (глобальных) состояний системы ТП — P и начальная реакция системы ТП определяются выражением

$$\rho_0: C_0 \times X \rightarrow Y,$$

причем

$$(x, y) \in P \Leftrightarrow (\exists C_0) [\rho_0(C_0, x) = y]. \quad (9.7)$$

Определение 5. Пусть S — временная система и время $t \in T$, тогда объектом состояний в момент времени, обозначаемым через C_t , называют объект начальных состояний для сужения S_t . Это множество, для которого найдется такая функция

$$\rho_t: C_t \times X_t \rightarrow Y_t,$$

что

$$(x_t, y_t) \in S_t \Leftrightarrow (\exists c) [\rho_t(c, x_t) = y_t]. \quad (9.8)$$

При этом функцию ρ_t называют реакцией системы в момент времени, а семейство всех реакций данной системы, т. е.

$$\bar{\rho} = \{\rho_t: C_t \times X_t \rightarrow Y_t, t \in T\}, \quad (9.9)$$

— семейством реакций системы, а множество

$$\bar{c} = \{C_t: t \in T\}. \quad (9.10)$$

семейством состояний объектов.

Авторы работы [125] доказали теорему (2.1 в [125], что для каждой временной системы существует семейство реакций.

Определение 6. Временная система допускает динамическое представление тогда и только тогда, когда найдутся два таких семейства отображений:

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \{\rho_t: C_t \times X_t \rightarrow Y_t, \text{ \& } t \in T\}; \\ \bar{\varphi} &= \{\varphi_{t-t'}: C_t \times X_t \rightarrow C_{t'}, \text{ \& } t \in T, \text{ \& } t' > t\}.\end{aligned}\quad (9.11)$$

Функции $\varphi_{tt'}$ называют функциями перехода состояний системы.

Можно заметить, что выражение (9.10) в некотором роде является обобщением приведенного в главе 2 представления о конечном автомате Мили. Вернее, автоматное описание — один из частных случаев или сужение общесистемного описания.

Для описания технологического процесса принимаем в первом приближении, что $X = \text{const}$, т. е. множество наблюдаемых (измеряемых) параметров входных объектов не меняется во времени и соответственно:

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \{\rho_t: C_{p(t)} \times X \rightarrow Y_t, \text{ \& } t \in T\}; \\ \bar{\varphi} &= \{\varphi_{t-t'}: C_{p(t)} \times X \rightarrow C_{p(t')}, \text{ \& } t, t' \in T\}.\end{aligned}\quad (9.12)$$

Значит, внутри технологического процесса существует множество состояний \bar{C}_p . Между ними могут происходить переходы, описываемые семейством отображений $\bar{\varphi}$, а выходной продукт, определяемый множеством наблюдаемых (измеряемых) параметров Y , вообще говоря, зависит от состояния $C_{p(t)}$ ТП и времени t , в которое происходит наблюдение (измерение).

Несомненно, что технологический процесс всегда содержит какое-то количество этапов, описываемых семейством отображений $\bar{\varphi}$, а полупродукт, существующий на каждом этапе ТП, — семейством отображений реакций $\bar{\rho}$. В приближении, описывающем существующий уровень развития технологии, считаем ТП строго детерминированным, т. е. все его стадии и этапы строго повторяющимися и воспроизводимыми.

Однако сейчас нас интересуют пока только полное множество отображений $\{\bar{\rho}, \bar{\varphi}\}$, которое, согласно [125], полностью описывает весь путь существования динамической системы (в случае, конечно, если таковое существует вообще). Сказанное выше необходимо сопроводить очередным определением.

Определение 7. Если задано некоторое семейство функций

$$\bar{\rho} = \{\rho_t: C_{p(t)} \times X \rightarrow Y_t, \text{ \& } t \in T\},$$

то можно считать, что ρ допускает динамическую реализацию тогда и только тогда, когда найдутся такая временная система P и такое семейство функций

$$\bar{\varphi} = \{\varphi_{t-t'}: C_{p(t)} \times X \rightarrow C_{p(t')}, \text{ \& } t, t' \in tT\},$$

что $\bar{\rho}$ согласуется с P , а пара $(\bar{\rho}, \bar{\varphi})$ является динамическим представлением системы P . Авторы работы [125] доказали, что для каждой временной системы P существует дина-

мическое представление, т. е. всегда найдутся два семейства отображений, согласующихся с P .

Для дальнейшего развития представления о технологическом процессе и получения возможности определения «оптимальности» ТП, необходимо ввести понятие минимальной реализации системы.

Формальная процедура введения понятия минимальной реализации начинается с выделения класса L_D интересующих нас систем, затем проводится определение отношений эквивалентности в выделенном классе систем, и в каждом классе эквивалентности вводится некоторое положение порядка, с помощью которого определяется минимальность реализации.

Вполне объясним тот факт, что системы сравниваются только внутри одного класса. Этот принцип имеет глубокие корни в более «традиционной» отрасли науки — теории измерений. Там в случае необходимости сравнения различных по классу объектов существует лишь одна шкала — шкала наименований, сводимая исключительно к распознаванию класса объекта и присвоения ему наименования. Других «взаимоотношений» между представителями различных классов не существует. Лишь внутри класса уже появляется возможность вводить шкалы более высокого порядка (отношений, интервалов, порядка и т. п.).

Вполне также объяснимо, что далее с целью выбора минимальной реализации будем сравнивать эквивалентные системы, т. е. системы, обладающие одинаковыми парами множеств вход—выход. Более строгих определений эквивалентности приводить не будем, чтобы не завуалировать суть излишними формальными построениями, поскольку они так или иначе входят в данные ниже определения минимальности систем.

Определение 8. Реализацию (\bar{p}, \bar{f}) называют реализацией с минимальным пространством состояний тогда и только тогда, когда для любой динамической системы (\hat{p}, \hat{f}) из того же класса L_D

$$P_{\hat{p}}^{\hat{f}} = P_p^f \Rightarrow K(C_p) \leq K(\hat{C}_p), \quad (9.13)$$

где $K(C_p)$ и $K(\hat{C}_p)$ — соответственно мощности пространств состояний системы P (технологического процесса).

Отметим, что это не единственное определение минимальности систем. Ниже мы приведем еще некоторые определения. Вообще говоря, для них минимальная реализация ТП не должна быть единственной, однако в работе [125] доказывается, что минимальные реализации реакций системы на входные воздействия единственны с точностью до изоморфизма. В данном случае нас интересует сам факт существования минимальной реализации $\{\bar{p}, \bar{f}\}$, ибо, во-первых, это существование позволяет более строго судить о количественных соотношениях между различными технологическими процессами. Вполне очевидно, что, к примеру, из пункта А в пункт Б и из пункта А в пункт В в определенном городе можно

проехать бесконечным множеством маршрутов (строго говоря, множество несамопересекающихся маршрутов, конечно), но для сравнения длин пути между А и Б и между А и В необходимо, несомненно, сравнивать только минимальные маршруты. Во-вторых, это существование позволяет ввести наиболее общее определение понятия информации.

Определение 9. Количество информации объекта X об объекте Y , принадлежащих к одному классу L_D , определяется мощностью множества состояний минимальной динамической реализации $\{\bar{\rho}, \bar{\varphi}\}$ системы S , преобразующей X в Y .

Несложно показать, что представление об алгоритмической информации и многие аспекты семантических теорий информации являются частными случаями определения 9. Кроме того, определение 9 не накладывает каких-либо ограничений на объекты X и Y .

Представим теперь, что технологический процесс в «пути» от C_x -состояния, характеризуемого набором наблюдаемых (измеряемых) параметров X до C_y -состояния, характеризуемого набором параметров Y , проходит n состояний $C_x, C_1, C_2 \dots C_{n-1}, C_y$, но лишь последнему из них соответствует реакция ρ_{n-1} , приводящая к конечному продукту — состоянию C_y . На основании такого подхода можно сформировать ряд представлений об идеальном технологическом процессе.

Определение 10. Идеальным технологическим процессом преобразования объекта, характеризуемого набором наблюдаемых (измеряемых) параметров X , в объект, характеризуемый набором наблюдаемых (измеряемых) параметров Y , называют технологический процесс, представляющий собой систему в случае ее минимальной динамической реализации.

Очевидно, что данный ТП будет иметь минимальную мощность пространства состояний. Из этого вытекает следующее:

Следствие 1. Идеальным ТП является ТП преобразования объекта X в объект Y , использующий полностью информацию об объекте Y при его производстве.

Следствие 2. В случае состояний идеального ТП $C_{x1}, C_1, C_2 \dots C_{n-1}, C_y$ информация X об Y будет определяться выражением

$$I(X/Y) = I(X/Y_{c_1}) + I(Y_{c_1}/Y_{c_2}) + \dots + I(Y_{c_{n-1}}/Y). \quad (9.14)$$

Очень важно, что в случае идеального ТП информация начального состояния о любом состоянии равна сумме всех предыдущих данному состоянию информации о последующих состояниях:

$$I(X/Y_{c_k}) = I(X/Y_{c_1}) + I(Y_{c_1}/Y_{c_2}) + \dots + I(Y_{c_{k-1}}/Y_{c_k}). \quad (9.15)$$

В таком аспекте, например, получение детали из металла через последовательность стадий:

C_x	—	C_1	—	C_2	—	C_3	—	C_y
исходный продукт		расплав		отливка		деталь, обработанная на токарном станке		готовая деталь после шлифования

будет не идеальным по сравнению с ТП:

C_x	C_y
исходный продукт	—готовая деталь после горячей штамповки из порошка

так как второй ТП имеет меньшую динамическую реализацию перехода от объекта X к объекту Y .

Если рассмотреть с этих позиций получение из мономера и других компонентов, объединенных множеством наблюдаемых (измеряемых) параметров X —

искусственного $Y_{(1)}$ и естественного $Y_{(2)}$ волокна, то очевидно, что отработанный миллионами лет эволюции ТП получения естественного волокна будет наиболее близок к «идеальному», а процесс получения искусственного не идеален и имеет недостатки типа представленных на рис. 65. Кроме того, здесь безуспешны попытки «пойти вспять», т. е. перейти, например, от состояния C_3 (в котором полимер уже имеет достаточно существующую конфигурационную информацию) к состоянию C_2 , где эта информация частично или полностью отсутствует

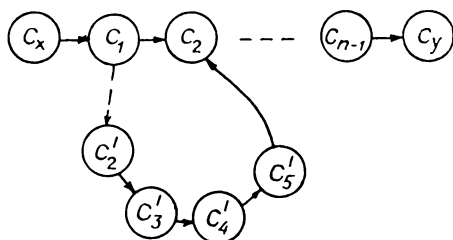


Рис. 65. Стадии технологического процесса.

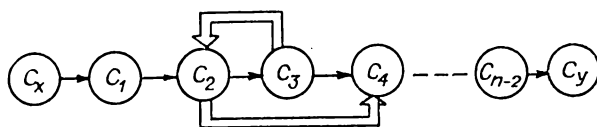


Рис. 66. Стадии технологического процесса.

(рис. 66). Однако любое обратное движение по маршруту ТП очень часто невозможно и приводит к необратимым потерям информации. В результате получаемый продукт Y гораздо хуже по качеству, чем продукт, полученный без самопересечений и обратного движения. Здесь неверна сама идеология ТП, не использующего полностью всю информацию, заложенную в макромолекулах.

На пути к идеальному ТП могут помочь различные сведения, описывающие параметры полупродуктов на конкретных его этапах (в определенном состоянии). К таким сведениям можно отнести, например, диаграмму Фишера, упоминающуюся выше.

Отметим важное внутреннее противоречие, присущее в той или иной мере всем концепциям информации. Дело в том, что приведенное общее системное определение информации содержит в себе понятие минимальной динамической реализации системы преобразования объекта, характеризуемого множеством наблюдаемых

(измеряемых) параметров X , в объект, отличающийся множеством наблюдаемых (измеряемых) параметров Y через мощность множества состояний $\{\varphi, \bar{\rho}\}$, где

$$\bar{\rho} = \{\rho_t : C_t \times X \rightarrow Y_t, \text{ \& } t \in T\},$$

$$\bar{\varphi} = \{\varphi_{tt'} : C_t \times X \rightarrow C_{t'}, \text{ \& } t, t' \in T\}.$$

Понятие информации содержит две части — первую, которую можно сравнить с видимой вершиной айсберга — множество ρ , приводящее к Y_t , соответствующим второй части — множеству состояний C_t (невидимому основанию айсберга), которые, в отличие от Y_t , не наблюдаемы и могут определяться более или менее точно только через их наблюдаемые характеристики Y_t . Интересно, что здесь уже как бы заложен принцип необходимости науки для технологии. Ведь чем точнее идентифицировано состояние C_t через множество наблюдаемых Y_t , тем вернее может быть построен близкий к идеальному ТП. Однако, положение когда величина (информация) состоит из части, измеряемой с достаточно большой точностью, и части, определяемой достаточно произвольно, не позволяет пользоваться такого рода представлением. Здесь вполне логично вытекает необходимость применения строгих принципов идентификации или распознавания образов для установления состояний ТП. Особенно острым отмеченный недостаток при обращении к семантической концепции информации. Там понятие *состояние* просто постулируется, причем это можно осуществить различным образом. Современная теория распознавания образов позволяет более воспроизводимо пользоваться концепцией состояния для оптимизации ТП. Однако существующие методы распознавания, приводящие к идентификации состояний систем, достаточно разнородны, а для определенности и однозначности оценки информации необходимо было бы создать некоторую инвариантную алгоритмическую систему. В главе 10 мы приведем описание алгоритмической измерительной машины, которая однозначно проводит измерение наблюдаемых характеристик объекта и по их результатам создает так называемый кластер признаков необходимого и достаточного для идентификации состояния объекта. Такой подход впервые позволяет наряду с измерением (подсчетом) информации, содержащейся в наблюдаемых (измеряемых) характеристиках, учесть и неявную информацию, которая необходима для идентификации состояний системы.

Еще в 30-е годы академик Н. Н. Семенов говорил о химической технологии будущего, где источник энергии, машина и материал будут представлять одно целое [10].

В настоящее время, когда методы кибернетики активно внедряются в производство, это уже не столь фантастично. Активно разрабатываются и принципы самоорганизующегося управления ТП.

Согласно [126], процесс управления называют самоорганизующимся, если уменьшение априорных неопределенностей, приводящее к эффективному им управлению, достигается за счет использования информации, получаемой в ходе его реализации из последовательности наблюдений доступных входных и выходных сигналов.

При рассмотрении возможностей самоорганизации ТП возникает вопрос об его избыточности. Ведь достижение глобального минимума динамической реализации, как и вообще всего идеального, невозможно, и реальная реализация ТП всегда несколько больше идеальной. Эту разницу

$$K(C_p) - K(C_p)_{\min} \Rightarrow I_p \quad (9.16)$$

мы и будем называть избыточностью ТП. В понятие избыточности заложено скрытое значение. Начнем с простого. Не вызывает возражений утверждение о том, что наличие в ТП избыточности — резерв для его улучшения. Особое значение понятия избыточности имеет в случае самоорганизующейся системы. Здесь оно оказывается необходимым условием для самого осуществления самоорганизации. Ведь если система достигла динамической реализации, близкой к минимальной, то у нее не остается и резервов для улучшения организации. Как же совместить эти вроде бы противоречивые требования при желании спроектировать близкий к идеальному самоорганизующийся ТП?

Возвращаясь к макромолекуле как объекту, уже обладающему некоторой информацией, отметим, что в случае изготовления из макромолекул какого-либо материала (например, конструкционного), практически любой полимер содержит гораздо больше информации, чем простое вещество, и позволяет при прочих равных условиях осуществить значительно больше вариантов самоорганизации структуры. Однако вернуться к определенной предыдущей стадии, через которую прошла макромолекула, и направить процесс в обратном направлении практически невозможно. Поэтому необходимо исследовать также «потенциальную избыточность» как источник самоорганизации. Это, несомненно, относится не ко всем системам без исключения и тесно взаимосвязано с вопросом об обратимости, поскольку если система обратима, т. е. допускает движение как вперед, так и назад по координате ТП, то ее избыточность может быть реализована через возврат к предыдущим стадиям с дальнейшим направлением ТП в иную сторону. В случае же необратимых ТП, к которым большей частью относятся ТП в технологии полимеров, возникает объективная необходимость вводить упомянутое понятие потенциальной избыточности.

Определение 10. Потенциальная избыточность ТП определяется мощностью множества пространства состояний всех возможных минимальных динамических реализаций $\{p, \varphi\}$ технологического процесса P , преобразующих X в Z , Z — множество всех произвольных объектов, которые возможно получить из X :

$$I_x^n \Rightarrow k(P_{xz}). \quad (9.17)$$

Допустим, существуют такие ТП получения ПММА, что в определенной степени соответствуют общепринятым представлениям (рис. 67), где ТП 1—4 соответственно: блочная, в растворе, эмульсионная и суспензионная полимеризация.

В этом случае потенциальной избыточностью I_{xz}^n мономера будет объединение мощностей множеств минимальных реализаций:

$$I_{xz}^n \Rightarrow K_{\min}(p_1) \cap K_{\min}(p_2) \cap K_{\min}(p_3) \cap K_{\min}(p_4), \quad (9.18)$$

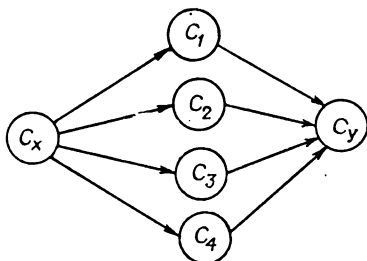


Рис. 67. Варианты технологического процесса получения полиметилметакрилата.

т. е. мономер имеет четыре потенциальных варианта превращения в полимер, и сумма всех состояний этих ТП (в случае, естественно, их минимальных реализаций) является его потенциальной избыточностью по отношению к реализации ТП P_{xy} . Однако из мономера можно в принципе получить не только ПММА, но и другие продукты (рис. 68). И множество, объединяющее минимальные реализации всех возможных ТП, и определяет полную потенциальную избыточность. Мы оставим в первом приближении «за кадром» дальнейшие превращения, которым будет подвергаться уже сам полимер. Отметим только, что сам путь ТП получения ПММА резко сужает потенциальную избыточность, поэтому точнее представить ТП в виде, показанном на рис. 69. Здесь Y_1 пойдет на изготовление крупногабаритных изделий, а Y_3 — на пропитку тканей и т. п. Подчеркнем, что за счет значительной конфигурационной

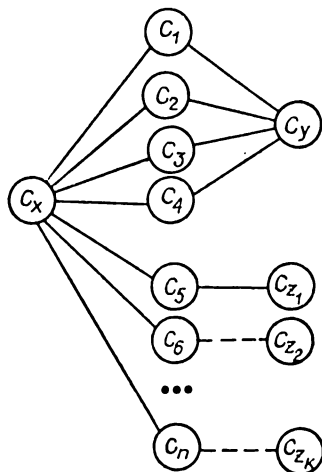


Рис. 68. Более полная схема вариантов технологического процесса получения полиметилметакрилата.

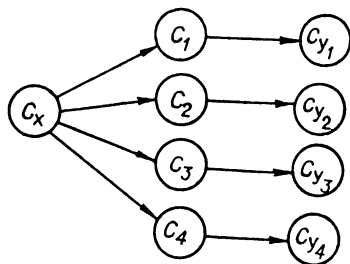


Рис. 69. Варианты технологического процесса.

информации полимерных макромолекул буквально на каждом этапе их переработки или создания происходит резкое сужение потенциальной избыточности*. И очень важно предвидеть всю дальнейшую эволюцию объекта на возможно более ранних стадиях. Осталось отметить, что для всех систем ТП получения ПММА должна существовать, как показано выше, некоторая глобальная минимальная динамическая реализация $K(C_p)G_{\min}$, по отношению к которой следует определять избыточность любого из вариантов ТП:

$$I_{xy} \Rightarrow K(C_{pl})_{\min} - k(C_p)G_{\min}. \quad (9.19)$$

Выявление этой избыточности, назовем ее системной, и является некоторой основой для совершенствования ТП на стадии проектирования.

Представляется уместным сказать, что, исходя из определения 9, система, обладающая большей системной избыточностью, отнюдь не заключает в себе больше информации об объекте Y , чем любая другая система с идентичным вход-выходными характеристиками X и Y .

Понятия I_{xy} , I_x^n и $K(C_p)$ имеют значение для определения наилучших вариантов ТП. Так, наибольшей потенциальной избыточностью I обладают молекулы мономера, однако они совершенно не способны самоорганизовываться в необходимом заданном направлении без значительных энергетических и других затрат. Совсем другое дело, когда исходная система — не просто мономер, а «структурированная жидкость», состоящая из реакционно-способных олигомеров. Многие из структур, которые необходимо было бы придавать полимеру в технологическом процессе, здесь уже существуют, т. е. уже имеется и значительная потенциальная избыточность, поскольку олигомерные заготовки имеют значительно больше вариантов организации (дальнейшей), чем готовые макромолекулы. В то же время они уже обладают и достаточной конфигурационной информацией для реализации процесса самоорганизации. Дальнейшие шаги на пути к «самоорганизующемуся ТП» заключаются во все более полной реализации потенциальной избыточности за счет внутренних информационных свойств объекта, постепенной замене громоздких внешних петель обратной связи внутрисистемными. ТП полимеризации, начинающийся с подготовленной системы (т. е. системы, в которую внесена достаточная информация, но еще обладающей заметной потенциальной избыточностью), имеет ряд преимуществ. Кстати, возможно, что естественная граница между полимером и олигомером и лежит в этой

* Сама конфигурационная информация задается способом полимеризации — не топологией (как в приведенном выше примере), а выбором того или иного стереоспецифического катализатора. Стереоспецифичность катализатора «компенсирует» отсутствие матричного синтеза, характерного для биологических систем. Если металл, например сталь, можно получить достаточно различающимися методами, а потом путем специальной термообработки привести практически к одной и той же структуре, то в случае полимеров это гораздо сложнее.

области: если длина макромолекул больше, то уже резко падает потенциальная избыточность, а если несколько меньше, то уменьшается системная информация. Можно предположить, что данная область оптимума возможности самоорганизации характерна и для всех временных динамических систем, поскольку выше мы не накладывали никаких сужений на общесистемное представление.

9.2. Адаптивные и самонастраивающиеся системы управления технологическими процессами

Современное химическое производство характеризуется следующими атрибутами (мы в определенной мере используем работу [127]):

- наличием большого количества взаимосвязанных и действующих совместно устройств, составляющих систему;

- достаточным разнообразием химических и физико-химических процессов;

- крупнотоннажностью;

- достаточным разнообразием внешних факторов, влияющих на ход ТП;

- достаточным разнообразием влияний внутренних характеристик объекта производства на его ход;

- нестационарностью статических и динамических характеристик этапов ТП;

- принципиальной невозможностью полного математического описания всего ТП;

- невоспроизводимостью многих характеристик ТП вследствие невозможности полного воспроизводства всех необходимых условий;

- существенной нелинейностью и нестабильностью процессов.

Следовательно, существующие ныне системы автоматического управления и регулирования с жесткими программами функционирования ТП в принципе не могут использоваться эффективно в современном химическом производстве.

Это влечет за собой необходимость разработки систем управления, которые могли бы в самом ходе этапов ТП производить подстройку параметров или даже изменение всего хода ТП в направлении к минимальной его системной реализации. В работе [127] авторы приводят три общих свойства, отличающих адаптивную систему управления от нелинейных и оптимальных систем;

- постоянный контроль с помощью дополнительных элементов и устройств за рабочими характеристиками и управление ими;

- некоторый показатель качества или числовая характеристика наблюдаемого поведения;

- изменение параметров устройства управления при изменении показателя качества с помощью дополнительных устройств, что

приводит к новым параметрам всей системы. Отметим, что данные свойства легко можно увидеть в достаточно современной системе автоматического управления. Для классов адаптивных и самообучающихся ТП мы рискуем добавить следующее свойство: ТП должен иметь программу регулирования, перестраиваемую автоматически при качественном изменении характеристик объекта и системы управления. Значит, в случае, когда параметры процесса выходят за пределы области оптимального регулирования, производится автоматическая перестройка алгоритма управления. Типичная схема самонастраивающегося устройства состоит из двух контуров: самонастройки и основного. Контур самонастройки выполняет три операции: определяет текущую динамическую характеристику системы, т. е. Y_t , вырабатывает сигнал самонастройки и перестраивает параметры регулятора в соответствии с выбранным критерием самонастройки. Анализатор процесса служит для полного или частичного определения динамических свойств объекта на основе текущей информации об объекте. Когда нормальный рабочий сигнал системы (наблюдаемое множество сигналов) недостаточен для получения необходимой информации для оценки процесса, то в анализатор включают генератор пробных сигналов (ГПС). Построение адаптивной системы проходит через следующие стадии [128, 129]: определение идеального закона регулирования; выбор структуры системы управления; выбор алгоритма адаптации; обоснование работоспособности системы.

Важно отметить, что на первой стадии синтеза адаптивной системы параметры объекта управления **п р и н и м а ю т с я** **и з в е с т н ы м и**, т. е. гипотетически мы считаем, что имеем полностью всю информацию об объекте (например, материале) и можем предсказать его эволюцию в течение ТП. Расстригин [130] методы синтеза делит на два: прямой и идентификационный. При прямом методе синтеза подстраиваемыми параметрами (оценками) являются коэффициенты эталонного регулятора, а при идентификационным — неизвестные параметры (коэффициенты) модели объекта управления.

В настоящее время предложены беспоисковые адаптивные системы управления [131, 132]. К ним относятся системы, включающие модели — эталонные и настраиваемые. Модель представляет собой динамическое звено со структурой, аналогичной структуре объекта управления, и с коэффициентами, доступными измерению. Отметим, что здесь в неясной форме уже используется принцип употребления информации, содержащейся в объекте. Динамическое звено со структурой, аналогичной структуре объекта управления, является, как правило, программой, соответствующей имеющейся информации об объекте (веществе), а, как указано выше, такого рода программа соответствует информации об объекте. Алгоритм настройки на основании текущей информации о наблюдаемых (измеряемых) параметрах объекта должен подстраивать поведение модели к поведению объекта (в том числе, напри-

мер, и методами эволюционного моделирования). Особое значение в таких системах имеет максимальная точность определения наблюдаемых параметров объекта. Эйкхофф [133] выделяет два основных типа идентификации: параметрическую и идентификацию состояния объекта управления. Параметрическая восстанавливает математическую модель объекта по измеряемым значениям входных и выходных переменных. Идентификация состояния объекта — получение оценок параметров вектора состояния объекта в случае невозможности непосредственного измерения этих параметров. Нам представляется, что данное разделение условно, поскольку по измеряемым значениям восстановление математической модели — состояния объекта — всегда условно. И, как правило, вектор состояния объекта не до конца определен и заменяется его оценкой.

Представляет интерес адаптивная система управления процессом получения полиэтилена в крупнотоннажных установках типа «Полимир» [134]. Построение модели процесса полимеризации происходит здесь в темпе с процессом на основании решения задачи идентификации. При этом модель объекта управления представляется в виде совокупности линейных моделей, каждая из которых задана в какой-то области пространства входных переменных. Внедрение адаптивной системы управления осуществлялось в две стадии: на первой адаптивный идентификатор использовался в режиме «советчика», т. е. адаптивная модель служила имитатором непрерывного анализа качества, давая оператору-технологу оценку показателя качества продукта в темпе с процессом в те моменты времени, когда на выходе системы появлялось измеренное значение показателя качества (через каждые 30 мин). В промежутках между измерениями модель не уточнялась. На второй стадии внедрения адаптивный идентификатор включался в контур управления, и управляющие воздействия определялись автоматически с помощью модели. В частности, рассчитывали установки аналоговых регуляторов, обеспечивающих стабилизацию показателя качества. Адаптация математических моделей косвенных измерений параметров — следующий этап в развитии таких систем.

АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ МАШИНА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ СОСТОЯНИЯ ОБЪЕКТА

В настоящее время широко применяют различные понятия элементарных алгоритмов, являющихся наименьшими элементами, на которые можно разложить практически любые из алгоритмов. Это машины Тьюринга, Поста, Маркова, Неймана, машины с неограниченными регистрами Шепердсона и Стерджиса [135] и т. п. Данные условные машины позволяют формализовать процессы решения задач, вычислений, выявить пределы возможностей алгоритмического описания процессов и объектов при условии, что их описание уже составлено и предметом вычислений является уже введенный в ЭВМ набор данных. Однако для получения точных количественных значений информации об объекте (процессе), необходимы, как показано в главе 9, не только точные данные измерений его наблюдаемых (измеряемых) характеристик, но и количественные данные об информации, необходимой для идентификации состояний этого объекта.

Задача этого раздела — описание некоторой условной «машины» (или алгоритма), имеющей минимальную конфигурацию и обеспечивающей полностью автоматическое формирование структуры измеряемого кластера параметров (СКП) на базе измерений его наблюдаемых характеристик и идентификацию состояния объекта, характеризуемого этим кластером, а также количественную оценку информации, необходимой для этого.

Таким образом, совмещая информацию, необходимую для формирования СКП (идентификации объекта) и измерительную информацию о наблюдаемых параметрах объекта, получаем полное и воспроизводимое информационное представление о данном объекте (процессе). При этом полностью обеспечивается автоматическое измерение всех параметров объекта в пределах области, в которой сохраняется непрерывность любого параметра в гиперпространстве остальных параметров.

При этом должен был быть обеспечен синергизм их воздействия на измеряемый объект, автоматическое создание многомерной шка-

лы второго уровня, создание банка измеряемых результатов. Если полагать, что, согласно [135], память измерительной машины состоит из неограниченного числа регистров, то в этом случае машина может создавать в своей памяти неограниченное число многомерных синергических гипершквал. Отметим, что при применении алгоритмической машины (АМ) процесс измерений не будет искусственно, по-умолчанию, считаться аддитивным, как это обычно принимается. Процесс измерений на АМ распадается на два этапа.

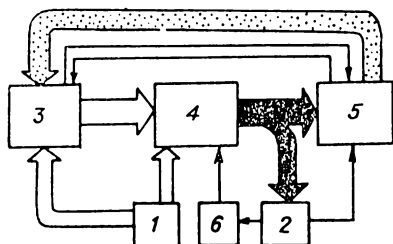


Рис. 70. Измерительная алгоритмическая машина.

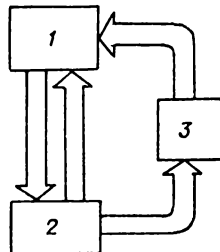


Рис. 71. Минимальная структура измерительной алгоритмической машины.

Вначале производится поиск кластеров параметров, в которых измеряемая величина неразрывна (т. е. является непрерывной функцией по Коши). При этом весь кластер в гиперпространстве параметров будет единицей измерительной шкалы наименований, а внутри кластера автоматически создается многомерная синергическая шкала более высокого порядка. В описываемой ниже АМ это шкала интервалов.

На рис. 70 представлена структурная схема измерительной машины, где 1 — блок ввода (инициации), 2 — измерительный блок, 3 — блок сравнения с эталоном, 4 — блок автоматов, 5 — блок накопления информации, 6 — блок контроля условия Коши.

Отметим, что блоки 3, 5, 6 могут быть описаны в виде «машин с неограниченными регистрами» (МНР) по [135], а блоки автоматов 4 и измерения 2 не описываются в терминах МНР. Поэтому возникла необходимость описывать работу измерительной машины в соответствии с рис. 70. Блок инициации 1 содержит также две группы неограниченных регистров. Исходя из того, что блоки 1, 3, 5, 6 описываются в терминах МНР, можно было бы в принципе в самом общем виде представить измерительную машину в виде, показанном на рис. 71, объединив МНР блоков в общую МНР. Однако для удобства функционального описания мы сохраним описание АМ на базе структуры рис. 70.

АМ работает следующим образом (пошаговые состояния АМ описаны в табл. 4).

В регистры блока инициации 1 вводится набор параметров $\{a_1, b_1, c_1, \dots, u_1\}$, определяющих произвольно заданную первую экспериментальную точку и значения интервалов $\{\Delta a, \Delta b, \Delta c, \dots, \Delta u\}$, за-

Таблица сигналов. Режим формирования СКП

Шаг № пп	На выходе бл. 6 (усл. коши)	На выходе		На выходе бл. 3 (вход бл. 4)	На входе бл. 5 (вых. бл. 2) вход бл. 2)	На входе бл. 5 (вых. бл. 2)	На входе бл. 5 (вых. бл. 3)	На выходе бл. 5 (вх. бл. 3)	Записано в память бл. 5
		бл. 1 (вход бл. 2 и бл. 3)	бл. 2 (вх. бл. 3 и бл. 5)						
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	a_1, b_1, \dots, u_1	0	0	0	0	0	0	
2	0	a_1, b_1, \dots, u_1	$y_{1,1,1,1}$	0	0	$y_{1,1,1,1}$	1	0	
3	0	a_1, b_1, \dots, u_1	$y_{1,1,1,1}$	0	0	$y_{1,1,1,1}$	1	a_1, b_1, \dots, u_k	
4	0	a_1, b_1, \dots, u_1	$y_{1,1,1,1}$	0	0	$y_{1,1,1,1}$	1	a'_1, b'_1, \dots, u'_k	
...	
ε	0	a_1, b_1, \dots, u_1	$y_{1,1,1,1}$	a_1, b_1, \dots, u_1	a_1, b_1, \dots, u_1	$y_{1,1,1,1}$	0	0	$a_1, b_1, \dots, u_1; y_{1,1,1,1}$
ε+1	0	a_1, b_1, \dots, u_1	0	a_1, b_1, \dots, u_1	a_2, b_1, \dots, u_1	0	0	0	
ε+2	0	0	$y_{2,1,1,1}$	0	a_2, b_1, \dots, u_1	$y_{2,1,1,1}$	0	0	$a_2, b_1, \dots, u_1; y_{2,1,1,1}$
ε+3	0	0	0	0	a_3, b_1, \dots, u_1	0	0	0	
ε+4	0	0	$y_{3,1,1,1}$	0	a_3, b_1, \dots, u_1	$y_{3,1,1,1}$	0	0	$a_3, b_1, \dots, u_1; y_3, \dots$
...
δ	1	0	$y_{n,1,1,1}$	0	$a_{n,1}, b_1, \dots, u_1$	$y_{n,1,1,1}$	0	0	$a_{n,1}, b_1, \dots, u_1; y_{n,1,1,1}$
δ+1	0	0	0	0	a'_1, b_1, \dots, u_1	0	0	0	
δ+2	0	0	$y'_{1,1,1,1}$	0	a'_1, b_1, \dots, u_1	$y'_{1,1,1,1}$	0	0	$a'_1, b_1, \dots, u_1; y'_{1,1,1,1}$
...	
ξ	1	0	$y'_{n,1,1,1}$	0	a'_n, b_1, \dots, u_1	$y'_{n,1,1,1}$	0	0	$a'_n, b_1, \dots, u_1; y'_{n,1,1,1}$

Окончание табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\xi+1$	0	0	0	0	$a_1, b_2, \dots u_1$	0	0	0	$a_1, b_2, \dots u_1; y_1, 2, \dots 1$
$\xi+2$	0	0	$y_{1,2, \dots 1}$	0	$a_1, b_2, \dots u_1$	$y_{1,2, \dots 1}$	0	0	
$\xi+3$	0	0	0	0	$a_2, b_2, \dots u_1$	0	0	0	
$\xi+4$	0	0	$y_{1,2, \dots 1}$	0	$a_2, b_2, \dots u_1$	$y_{2,2, \dots 1}$	0	0	$a_3, b_2, \dots u_1; y_3, 2, \dots 1$
$\xi+5$	0	0	0	0	$a_3, b_2, \dots u_1$	$y_{3,2, \dots 1}$	0	0	
...	
σ	1	0	$y_{m,2, \dots 1}$	0	$a_1, b_2, \dots u_1$	$y_{m,2, \dots 1}$	0	0	$a_m, b_2, \dots u_1; y_{m,2, \dots 1}$
$\sigma+1$	0	0	0	0	$a_1, b_3, \dots u_1$	0	0	0	
$\sigma+2$	0	0	$y_{1,3, \dots 1}$	0	$a_1, b_3, \dots u_1$	$y_{1,3, \dots 1}$	0	0	$a_1, b_3, \dots u_1; y_1, 3, \dots 1$
$\sigma+3$	0	0	0	0	$a_2, b_3, \dots u_1$	0	0	0	
...	
η	0	0	$y_{k,1, \dots f}$	0	$a'_k, b_e, \dots u_z$	$y_{k,1, \dots z}$	0	0	$a'_k, b_e, \dots u_z$
$\eta+1$	0	0	0	0	0	0	1	0	останов
Режим измерений									
1	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	0	0	0	0	0	0	
2	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k,1, \dots q}$	1	0	$a_k, b_1, \dots u_1;$
3	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k,1, \dots q}$	1	0	$y_{k',1, \dots 1}$
4	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k,1, \dots q}$	1	0	$a_k, b_1, \dots u_1;$
...	$y_{k',1, \dots 1}$
κ	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k,1, \dots q}$	1	0	$a_{k1}, b_{11}, \dots u_{q1};$
$\kappa+1$	0	$a_k, b_l, \dots u_q$	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k,1, \dots q}$	0	0	$y_{k, \dots q}$
									Входной сигнал идентифицирован

дающих шаг измерения параметров (в процентах к значению параметра) в блоке автоматов (этот шаг определяет минимальную цену деления многомерной гипершкалы). При подаче на вход измерительного блока 2 набора $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$ (эта подача происходит после записи параметров в блок 1) в нем осуществляется воздействие на объект измерений с величиной факторов воздействия (параметров), соответствующих $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$, и производится измерение неизвестного параметра $y_{1.1 \dots 1} = f\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$. Значение $y_{1.1 \dots 1}$ подается на вход блока накопления информации 5 и записывается в одном из его регистров. Набор $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1; u_{1.1 \dots 1}\}$ подается на выходы блока 3 и записывается в соответствующих его регистрах. При этом блок 3 выдает сигнал (например, «1» на управляющий вход блока 5). После этого в блоке 5 производится последовательное ассоциативное считывание имеющихся в его памяти наборов $\{a_i, b_j, c_k \dots u_q; y_{i,j \dots q}\}$ и их подача в блок сравнения с эталоном 3. Этот процесс происходит непрерывными шагами до тех пор, пока не будет найден набор, почленно равный (с точностью, определяемой погрешностью устройства сравнения блока 3) введенному в блок инициации набору $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$ и $y_{1.1 \dots 1}$. Тогда найденное значение будет являться отсчетом измеряемой величины по ранее сформированной многомерной шкале. Подробнее принципы ассоциативного считывания описаны в 10.1. Отметим, что измерительная машина может воспроизвести по одной или нескольким экспериментальным точкам $\{a_i, b_j, c_k \dots u_q; y_{i,j \dots q}\}$, если они совпадают с имеющимися в регистрах блока 5 наборами $\{a, b, c \dots u; y\}$, весь кластер непрерывности измеряемого параметра в любом необходимом для исследователя варианте.

В таком аспекте процесс измерений неотличим от общепринятого представления о процессе распознавания образов.

Если такой набор не будет отыскан либо в случае начала работы измерительной машины, на управляющий вход блока 5 подается управляющий сигнал блока 3 (например, «0»), и машина переходит в режим формирования структуры измеряемого кластера параметров (ФСКП). Отметим, что исходные значения $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$ сохраняются в регистрах блоков 1, 3, 5 все время проведения измерений.

10.1. Работа алгоритмической машины в режиме формирования кластера признаков

В этом режиме на вход блока автоматов 4 подается набор исходных параметров $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$. Этот набор записывается во входные регистры блока 4 и одновременно передается с выхода блока 4 на вход блока 5 и второй вход блока 2. При этом происходит запись набора исходных параметров $\{a_1, b_1, c_1 \dots u_1\}$ в регистры блока 5. В регистре этого блока записывается также зна-

$b=b_1=b_1'$, а затем $b_2=b_1+\Delta b$; $b_2'=b_1-\Delta b$; $\Delta b=\Delta b b/100$; β_{m_1} —

Таблица 5а

		Состояния автомата 2									
		α_1	α_2	\dots	α_{n_1-1}	α_{n_1}	α'_1	\dots	α'_{n_2-1}	α'_{n_2}	
Вход 1 →	α_1	α_2	α_3	\dots	α_{n_1}	α'_1	α'_2	\dots	α'_{n_2}	α_1	
		0				1	0			1	
		<div style="text-align: center;"> ↑ Вход 2 </div>									

В таблице 5 α — состояния автомата 2

a — значения выходного сигнала автомата 2, причем в начальный момент $a = a_1 = a_1'$, а затем:

$$a_2 = a_1 + \Delta a; \quad a_2' = a_1 - \Delta a;$$

 α_{n1} — состояние автомата 2 («вправо»* от исходной точки) α_{n2}' — „ («влево» от исходной точки)

$$a_{n_1} = a_1 + (n_1 - 1) \Delta a$$

Таблица 56

		Выходы автомата 2									
		α_1	α_2	\dots	α_{n-1}	α_n	α'_1	\dots	α'_{n-1}	α'_n	
Вход 1 →	a_1	a_1	a_2	\dots	a_{n-1}	a_n	a'_1	\dots	a'_{n-1}	a'_n	
		0				1	0			1	
		↑ Вход 2									

* Здесь и далее «влево» означает «в сторону уменьшения данного параметра, а «вправо» — «в сторону его увеличения».

состояние автомата 3 («вправо» от исходной точки); β'_{m_2} — состояние «влево» от исходной точки; $b_{m_1} = b_1 + (m_1 - 1)\Delta b$; $b'_{m_2} = b_2 - (m_2 - 1)\Delta b$. В нем производится воздействие на объект измерений с величиной факторов воздействия, соответствующих параметрам $\{a_i, b_j, \dots, u_q\}$, и осуществляется измерение параметра $y_{i,j,\dots,q}$, значение которого с выхода блока 2 подается на вход блока 5. В блоке 5 происходит одновременная запись значений $\{a_i, b_j, \dots, u_q\}$ и $y_{i,j,\dots,q}$ в соответствующие регистры. Кластер параметров формируется за счет наращивания значений Δa на a_1 :

$$a_2 = a_1 + \Delta a; a_3 = a_1 + 2\Delta a; \dots a_n = a_1 + (n - 1)\Delta a;$$

с постоянным измерением параметра y при воздействии всего набора параметров воздействий. В результате получаем соответственно наборы:

$$\{a_1, b_1, \dots, u_{1l}, y_{1,1,\dots,1}\};$$

$$\{a_2, b_1, \dots, u_{1l}, y_{2,1,\dots,1}\};$$

$$\{a_3, b_1, \dots, u_{1l}, y_{3,1,\dots,1}\}$$

и т. д.

Для описания механизма формирования кластера необходимо более подробно рассмотреть работу блока автоматов, поскольку принцип его работы не тривиален (рис. 72). Отметим, что автома-

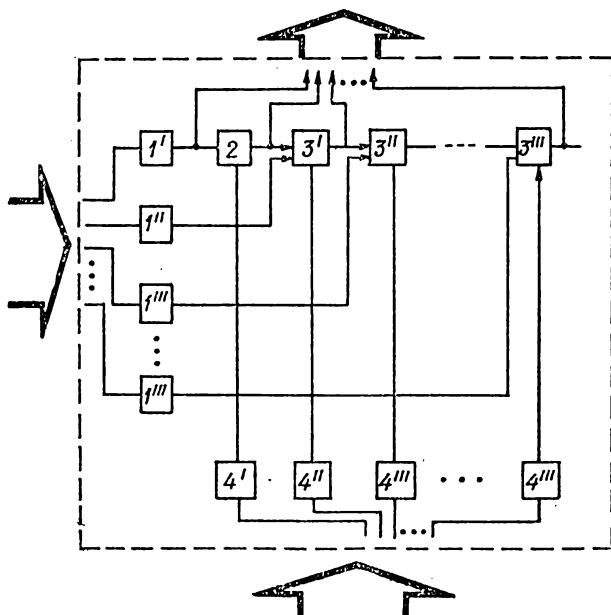


Рис. 72. Блок автоматов измерительной алгоритмической машины.

ты 2, 3 не являются конечными автоматами типа Мили, Мура и традиционно рассматриваемыми в теории автоматов. По принципу работы (см. табл. 5, 6) они ближе к типу автоматов, описанному фон Нейманом [15]. Отметим, что число состояний автоматов ($\alpha, \beta' \dots \beta^{n'}$) неограниченно. Остановка в росте числа состояний автоматов 2, 3 обусловлена только входными воздействиями, поступающими со второй группы входов. Блок 4 работает следующим образом: на его вход (рис. 72) подается набор $\{a_1, b_1, \dots, u_1\}$, кото-

Таблица 6а

Состояние автомата 3										
	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_2	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
a_1	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_2	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
a_2	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_2	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots
Вход 1 → a_{n_1}	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_2	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
a_2^1	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_1	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
a_3^1	β_1	β_2	\dots	β_{m_1-1}	β_{m_1}	β'_2	β'_3	\dots	β'_{m_2-1}	β_{m_2}
\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots
$a_{n_2}^1$	β_2		\dots	β_{m_1}	β'_2	β'_3	β'_4	\dots	β'_{m_2}	β_{m_1}
0					1	0				1

\uparrow
Вход 2

рый записывается в группу регистров, на входе. Этот набор остается в регистрах все время цикла измерений АМ в режиме ФСКП. При подаче на вход автомата 2 значения a_1 на выходе автомата немедленно появляется значение a_1 (табл. 4, 5), а автомат 2 переходит в состояние a_2 из состояния a_1 . При этом на выходах автоматов $3' \dots 3^{n'}$ появляются все значения первого набора $\{a_1, b_1, c_1, \dots, u_1\}$, передаваемые на выход блока автоматов к блоку 5. Одновременно все автоматы переходят в состояния в соответствии с

табл. 5, 6. В следующем такте автомат 2 переходит в состояние α_3 , а на выходах всех автоматов образуется слово $\{a_2, b_1, \dots, u_1\}$ и т. д.

Выходные сигналы блока 4 во время цикла ФСКП приведены в табл. 3.

Все автоматы 2 и $3' \dots 3^{n'}$ имеют состояния $(\alpha, \beta' \dots \beta^{n'})$, зависящие не только от входных сигналов и состояний в предыдущем такте $(\alpha_{\tau-1}, \beta_{\tau-1}, \dots, \beta_{\tau-1}^{n'})$, но и от сигналов, поступающих по второй

Таблица 66

		Выходы автомата 3									
		β_1	β_2	...	β_{m_1-1}	β_1	β'_2	β'_3	...	β'_{m_2-1}	β'_{m_2}
Вход 1 →	a_1	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_3	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_2}
	a_2	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_3	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_2}
	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
	a_{n_1}	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_3	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_2}
	a_2^1	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_2	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_1}
	a_3^1	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_3	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_2}
	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
	a'_{n_2}	b_1	b_2	...	β_{m_1-1}	b_{m_1}	b'_2	b'_3	...	b'_{m_2-1}	b'_{m_2}
		Вход 2 ↑									

группе управляющих входов. Эти сигналы поступают от блока 6 и сигнализируют о том, выполняется ли для y условие непрерывности Коши, т. е. не выходит ли y за пределы области непрерывного изменения (разрыв, переход к бесконечности и т. п.). Если условие Коши для y соблюдается, то на вторую группу входов и соответственно на ячейки памяти блока 4 подается «0», а если не соблюдается, то «1». При подаче «0» на вторые входы всех автоматов последние переходят в состояния, соответствующие формированию выходных сигналов. Например, в случае трех воздей-

ствующих на объект измерений параметров a, b, c последовательность формирования сигналов на выходе блока 4 будет следующей:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a_1, a_1, a_2, \dots, a_{n1} & a_1, a_2, \dots, a_{n2} & a_1, a_2, \dots, a_{nk} \\ b_1, b_1, b_1, \dots, b_1, & b_2, b_2, \dots, b_2, \dots & b_{m1}, b_{m1}, \dots, b_{m1} \\ c_1, c_1, c_1, \dots, c_1 & c_1, c_1, \dots, c_1 & c_1, c_1, \dots, c_1 \end{array} \right\}_1;$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a_1, a_2, \dots, a_{ns} & a_1, a_2, \dots, a_{n1} & a_1, a_2, \dots, a_{nQ} \\ b_1, b_1, \dots, b_1, & b_2, b_2, \dots, b_2 & \dots b_{m2}, b_{m2} \dots b_{m2} \\ c_2, c_2, \dots, c_2 & c_2, c_2, \dots, c_2 & c_2, c_2, \dots, c_2 \end{array} \right\}_2;$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a_1, a_2, \dots, a_{nV} & a_1, a_2, \dots, a_w & a_1, a_2, \dots, a_{nx} \\ b_1, b_1, \dots, b_1, & b_2, b_2, \dots, b_2 & \dots b_{m3}, b_{m3} \dots b_{m3} \\ c_3, c_3, \dots, c_3, & c_3, c_3, \dots, c_3 & c_3, c_3, \dots, c_3 \end{array} \right\};$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a_1, a_2, \dots, a_{nP} & a_1, a_2, \dots, a_{nB} & a_1, a_2, \dots, a_{nc} \\ b_1, b_1, \dots, b_1, & b_2, b_2, \dots, b_2 & \dots b_{mn1}, b_{mn1} \dots b_{mn} \\ c_k, c_k, \dots, c_k & c_k, c_k, \dots, c_k & c_k, c_k, \dots, c_k \end{array} \right\}_k.$$

Здесь для большей наглядности приведена последовательность, обрабатывающая только сектор со значениями параметров a, b, c соответственно $a > a_1; b > b_1; c > c_1$. Полностью пошаговая последовательность формирования всего кластера приведена в табл. 4.

В случае появления «1» на входах блока 4 (т. е. при подходе к «левой» границе кластера) и, соответственно, невыполнения условия Коши для y (блок автоматов переходит к состоянию $(\alpha'_1, \beta_1, \dots, u_1)$) и происходит формирование «левой» половины состояний кластера. Далее путем добавления по Δa (только со знаком минус) идет формирование этой половины с измерением соответствующих значений y и записью результатов в память блока 5. Это происходит до тех пор, пока опять блок 6 не выдаст «1», т. е. не подойдем к «левой» границе непрерывности. После этого согласно табл. 4 производится сдвиг по параметру b на Δb и отсчет снова «вправо». Далее блок автоматов работает таким же образом, заполняя полностью данными всю исследуемую область, в которой сохраняется непрерывность y . Когда все данные о кластере в гиперпространстве параметров заполнены и записаны в память блока 5, машина останавливается и переходит в режим ожидания сигнала инициации.

Таким образом, АМ изучает искомый параметр в окрестности предварительно заданной первой точки $\{a_1, b_1, c_1, \dots, u_1; y_{1,1}, \dots\}$. При этом не имеет значения, в каком месте непрерывного кластера значений в гиперпространстве параметров дана первая точка. Измерительная машина проведет измерения во всей области гиперпространства непрерывности.

Естественно, если область непрерывности простирается за пределы возможностей измерительного блока 2, то область работы АМ не выйдет за эти пределы. Однако в чисто теоретическом варианте АМ можно считать, что пределы измерений блока 2 всегда

шире границ кластера параметров. В случае же использования теории АМ для формирования реальных алгоритмов ИИС АМ может, например, потребовать подключения измерительных приборов с более широким диапазоном измерений.

При измерениях в условиях многофакторного воздействия (по нашему мнению, к ним относятся все без исключения измерения) часто не выясняют, насколько правомерно измерять данную величину конкретным прибором при отсутствии вариации по остальным вариантам полного набора возможных воздействий на объект измерений.

Как пример такого подхода можно привести измерение характеристик воды в диапазоне температур 80...110 °С. Обычно, разделяют область характеристик воды на кластеры: 273...0 °С, 0...100 °С, 100 °С и т. п., т. е. при проведении измерений исследователь осуществляет значительную предварительную работу по выделению области непрерывности параметров, в которой будет производиться измерение. Однако, как правило, это делается по умолчанию на основе нестрогих посылок и в конечном итоге ведет к тому, что измерения, проведенные со значительной точностью, имеют методическую погрешность, полностью нивелирующую значение полученных результатов из-за отсутствия оценки информации, необходимой для идентификации объекта измерений.

Отметим, что применение принципа АМ впервые позволяет перейти к аксиоматическому описанию всего процесса измерений.

Вследствие развития таких отраслей, как синергетика, общая теория систем, теория самоорганизации и имитационное моделирование сложных систем, результат научных исследований все чаще заключается в создании имитационной синергической модели явления, процесса, исходя из которой можно получать данные об объекте исследований, прогнозировать его характеристики при заданных факторах внешнего воздействия. Возможно также получать воспроизводимые на модели реальные характеристики объекта при повторении адекватного набора входных параметров.

Если ранее таким целям довольно ограниченно служили таблицы, графики, диаграммы, то теперь, когда мы записываем в памяти измерительной машины многомерные гипертаблицы, уже нецелесообразно выводить их на печать в явном виде. Необходимый для наглядности двух- трехмерный график можно вывести в качестве выборки из гипертаблиц. Таким образом, АМ — представитель устройств «безбумажной информатики».

В условиях применения АМ информация, используемая при идентификации объекта, определяется числом шагов машины при создании СКП, т. е. описание с применением АМ позволяет вычислять полностью алгоритмическую информацию процесса измерений по Колмогорову [11], в том числе и содержащуюся в «подводной части айсберга».

10.2. Ассоциативное считывание информации

Процесс ассоциативного считывания информации можно показать на примере трехпараметрического пространства с тремя последовательными значениями каждого фактора (шкала из трех делений).

При этом выбирают значения трех известных параметров (a , b , c) и соответствующие им значения неизвестных (определенных ранее) параметров y , в которых, к примеру, значение, отвечает выражению $|a_i - a_3| \leq \epsilon$, где a_3 — заданное значение параметра a_i ; затем из числа отобранных выбирают тройки (a , b , c) и значения y , для которых a_i , b_j соответствуют выражению

$$|a_i - a_3| \leq \epsilon_1, |b_j - b_3| \leq \epsilon_2.$$

Затем из числа отобранных выбирают тройки (a , b , c) и значения y , для которых a_i , b_j , c_k соответствуют выражению

$$\begin{aligned} |a_i - a_3| &\leq \epsilon_1; \\ |b_j - b_3| &\leq \epsilon_2; \\ |c_k - c_3| &\leq \epsilon_3, \end{aligned}$$

где ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 — некоторые заданные малые числа.

Ассоциативным данный процесс назван из-за того, что в случае поиска этих наборов в памяти ЭВМ, поиск производится не по порядку номеров ячеек или секторов, блоков памяти, а по значениям параметров. Варианты такого поиска достаточно подробно изложены в работе [136].

Продуктом научных исследований являются знания. Существует несколько типов знаний. Согласно Лаврову С. С., таковыми являются:

понятийные знания (набор понятий, которыми пользуется человек в определенной области, свойства и взаимосвязи этих понятий);

конструктивные знания (знания о возможной структуре и взаимодействии частей различных объектов в определенной области);

процедурные знания (методы, алгоритмы и программы решения различных задач);

фактографические знания (количественные и качественные характеристики конкретных объектов, явлений, элементов).

Автоматизация научного эксперимента освоила сегодня лишь нижний — фактографический — уровень знаний. Системы автоматизации научных исследований (САНИ) обеспечивают получение количественных характеристик объектов исследований. В дальнейшем полученные фактографические знания человек использует для формирования конструктивных знаний. Так замыкается первая петля обратной связи. Сначала человек, желая получить конструктивные знания об объектах, предполагает, что качественные и количественные характеристики объектов (фактографические знания) находятся в определенной области значений, затем САНИ

обеспечивает воздействия на объекты и получение их действительных (уточненных) характеристик, после чего человек без помощи ЭВМ строит уточненную гипотезу, конструктивную модель объекта.

На основании нескольких (достаточного числа) конструктивных моделей, обеспечивающих конструктивные знания, человек, опять-таки без помощи САИИ и ЭВМ, формирует понятийные знания. Здесь также возможна петля обратной связи. От гипотезы о том, что ряд конструктивных моделей соответствуют все вместе одному понятию или явлению, человек переходит к гипотезам об области значений, определяемых фактографическим знанием, к уточнению этих гипотез и затем опять через конструктивные модели к формированию понятийных знаний.

Какие есть варианты реализации алгоритма формирования знаний в настоящее время? Возьмем, к примеру, механику материалов. Здесь постановка задачи всегда связана с эксплуатацией конкретных конструкций. Таким образом, для практики применяется на уровне понятийных знаний понятие эксплуатационная надежность (в рамках существующей парадигмы), а на другом уровне производится гипотеза о необходимом и достаточном количестве конструктивных знаний, обеспечивающем реализацию понятийного знания о надежности конструкций, узла.

Характерно, что объем конструктивных знаний, определяемых гипотезой, зачастую не формализован. Так, одними исследователями принимается, что для получения ответа на понятийном уровне достаточно иметь знания о прочности на разрыв, твердости, температурных зависимостях этих величин. При этом получаемые конструктивные знания имеют логическую форму: прочность достаточна (недостаточна), твердость в нужном диапазоне (не в нужном диапазоне) и т. п. Однако, и это важно отметить, ответы на конструктивном уровне знаний полезны объективно ровно настолько, насколько правильна первичная гипотеза. Так, в рамках другой гипотезы к необходимым конструктивным знаниям добавляется, например, циклическая усталость. Кроме того, нужно учитывать и связи между понятиями на уровне понятийных знаний и между конструктивными знаниями на их уровне. Здесь подход так же субъективен, как и к определению значимости каждого из конструктивных параметров для формирования понятийного знания. Все это ведет к неоднозначности подхода к экспериментальным исследованиям, различным трактовкам экспериментальных данных, и, что особенно опасно, к принятию необоснованных решений на базе субъективно сформированных знаний понятийного уровня. Кроме того, при существующем подходе остается неизвестной полная информация, получаемая исследователем при сформированном наборе конструктивных знаний, при сформированном понятийном знании.

Нашей задачей являлось создание человекомашинной системы автоматизации научных исследований, обеспечивающей объективное формирование знаний на всех уровнях. Первым блоком систе-

мы является формирование иерархии понятийных и конструктивных знаний. Дело в том, что четкого однозначного представления о месте знаний в области понятийных или в области конструктивных также нет. По-видимому, столь строгое разбиение здесь уместно лишь для иллюстрации самого принципа структурирования знаний. А на самом деле существуют следующие уровни знаний: конструктивные

$$k_1, k_2, \dots, k_n;$$

понятийные

$$\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_m.$$

Поэтому формирование структуры $\Pi_i \leftarrow \{k_j, k_{j+1}, \dots, k_n\}$ должно проводиться в одном понятийном тезаурусе, пока объективно не проведено разделения между уровнями.

Важным этапом формирования правильного иерархического «дерева» является постановка вопроса о связи между знаниями: каким образом четко формализовать отношение между ними. Здесь нам представляется уместной формулировка 1: «необходимо ли (в числе других) знание k_{n-1} , чтобы утверждать, что достоверно знание k_n ?».

Для анализа структуры знаний полезен аппарат теории бинарных отношений. В терминах этой теории можно формулировку 1 заменить отношением предпочтения. Будем считать, что знание k_n является знанием более высокого уровня, чем k_{n-1} , если k_{n-1} необходимо для утверждения, что достоверно знание k_n . В этом случае k_n предпочтительнее k_{n-1} . После введения отношений предпочтения структура формирования знаний становится структурой типа «доминирование—безразличие».

Для организации дерева знаний важно, что отношение предпочтения обладает свойством обобщенной транзитивности. За счет этого структура «доминирование—безразличие» при проведении попарного сравнения объектов из некоторого множества A обладает таким свойством, что множество A можно разбить на непересекающиеся классы эквивалентности (разбиения). Важно, что между разбиениями будет существовать отношение строгого предпочтения.

Отметим, что существует ряд оптимальных алгоритмов разбиений множества знаний.

Для реализации одного из них необходимо провести экспертную оценку. Для этого из тезауруса знаний по данной области выделяем множество знаний A и строим матрицу инцидентий. Матрица заполняется группой экспертов по правилу: в клетке ставится 1, если для утверждения, что достоверно знание A_i , необходимо знание A_j ; 0, если наоборот, и X , если знания A_i и A_j безразличны друг другу. Для обработки матрицы можно использовать известный алгоритм Пиша.

В результате анализа матрицы на ЭВМ получаем объективные разбиения множества A с четкими отношениями предпочтения.

Исходя из построенного в итоге графа знаний получаем возможность заменить узлы, названные «гипотеза», на узлы, названные «результат разбиения знаний». И уровней, согласно нашему предложению, может здесь быть несколько, хотя и не намного больше.

Важно отметить, что в результате разбиения появляется возможность вычислить полное количество информации, получаемой в результате автоматизированного эксперимента. При этом информация, содержащаяся в знаниях понятийного уровня, определяется в терминах семантической информации, а информация, содержащаяся в каждом кластере конструктивных знаний, — с применением алгоритмической измерительной машины.

Список литературы

1. Советский энциклопедический словарь. М., 1982.
2. Frenkel S. Molecular cybernetics // Sov. sci. rev. 1971. Vol. 6. N 2. P. 110—118.
3. Френкель С. Я. Полимеры: проблемы, перспективы, прогнозы // Физика сегодня и завтра: Сб. науч. ст. Л., 1973. С. 176—270.
4. Френкель С. Я. Макромолекула // Энциклопедия полимеров: В 2 т. М., 1974. Т. 2. С. 101—133.
5. Хохлов А. Р., Гросберг А. Ю. Физика цепных молекул. М., 1984.
6. Гросберг А. Ю., Хохлов А. Р. О нерешенных проблемах статистической физики макромолекул. М., 1985.
7. Hill T. Thermodynamics of small systems. N. Y.; Amsterdam, 1967.
8. Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах // Введение в теорию диссипативных структур. М., 1979.
9. Опарин А. И. Этапы предбиологической эволюции // Пробл. возникновения и сущности жизни: Сб. науч. ст. М., 1973. С. 156—172.
10. Семенов Н. Н. В Лесном близ Ленинграда // О Физико-техническом институте. Литературный Ленинград, 1934, 24 янв.
11. Колмогоров А. Н. Три подхода к определению понятия «количество информации» // Пробл. передачи информации, 1965. Т. 1. № 1. С. 3—12.
12. Carnap R. Semantic information // Brit. Journ. Philos. Sci. 1953. Vol. 14. P. 382—390.
13. Управление, информация, интеллект / Под ред. Берга А. И., Бирюкова Б. В., Геллера Е. С., Поварова Г. Н. М., 1976.
14. Франк-Каменецкий М. Д. Самая главная молекула. М., 1983.
15. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М., 1971.
16. Кузнецов О. П., Адельсон-Вельский Г. М. Дискретная математика для инженера. М., 1980.
17. Бусленко В. Н. Автоматизация имитационного моделирования сложных систем. М., 1977.
18. Richard J. Les principes des mathématiques et le problème des ensembles // Rev. générale des sci. pur. appl. 1905. 16. P. 541—543.
19. Флори П. Статистическая механика цепных молекул. М., 1971.
20. Варшавский В. И., Поспелов Д. А. Оркестр играет без дирижера. М., 1984.
21. Эйген М., Шустер П. Гиперцикл. М., 1982.
22. Студитский А. Н. Эволюционная морфология клетки. М., 1981.
23. Тюдзе Р., Каваи Т. Физическая химия полимеров. М., 1977.
24. Александров Е. А. Основы теории эвристических решений. М., 1975.
25. Фогель Л., Оуэнс А., Уолш М. Искусственный интеллект и эволюционное моделирование. М., 1969.
26. Пыrkов Л. М. Химические волокна. М., 1969.
27. Френкель С. Я., Бараков В. Г., Панов Ю. Н. и др. Об ориентационном механизме образования твердой фазы в умеренно концентрированных растворах полимеров // Механизмы процессов пленкообразования из полимерных растворов и дисперсий: Сб. науч. ст. М., 1966.
28. Нейрат Г., Бейли К. Белки. М., 1956.
29. Блюменфельд Л. А. Проблемы биологической физики. М., 1977.
30. Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М., 1982.
31. Бреслер С. Е. Введение в молекулярную биологию. М.; Л., 1966.
32. Harrington W., Von Hippel P. Collagen // Encycl. Polymer Sci. technol. // Vol. 4, 1966. P. 1—16.

33. Волькенштейн М. В. Молекулы и жизнь. М., 1965.
34. Френкель С. Я. Полимеры // Физический энциклопедический словарь. М., 1965. Т. 4. С. 93—101.
35. Френкель С. Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. Л., 1965.
36. Moraglio G., Danusso F. A new transition in polystyrene // I. A transition of polystyrene common to the bulk and molecularly dispersed phases // Polymer. 1963. Vol. 4. N 4. P. 445—447.
37. Васильева Е. Н., Халифман И. А. Сквозь толщу лет. М., 1982.
38. Кастлер Г. Возникновение биологической организации. М., 1967.
39. Евреинов Э. В. Однородные вычислительные системы, структуры и среды. М., 1981.
40. Elsasser W. The Physical foundation of biology. N. Y., 1958.
41. Волькенштейн М. В. Молекулярная биофизика. М., 1975.
42. Равен Х. Оогенез. М., 1964.
43. Елисеев Э. Н. Структура сложных систем. Л., 1983.
44. Kühn K. Die Quellung des Kollagen fibrille und ihre Rückbildung. Die Kolloiden Lösungen // Kolloid. — Z. u. Z. Polymere. 1962. Vol. 182. N 1—2. P. 93—98.
45. Кузнецова В. Л. Анализ и разработка многозначных нейронных сетей самоорганизующихся систем: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. Львов, 1984.
46. Винер Н. Кибернетика, или управление и связь в животном и машине. М., 1968.
47. Ивахненко А. Г., Зайченко Ю. П., Димитров В. Д. Принятие решений на основе самоорганизации. М., 1976.
48. Кубо Р. Термодинамика. М., 1970.
49. Ельяшевич Г. К., Френкель С. Я. Влияние специфических взаимодействий полимер—растворитель на фазовые переходы в растворах полимеров // Высокомолекулярные соединения. 1969. А11. С. 323—328.
50. Frenkel S. Thermokinetics of formation of ordered structures in polymer solution and gels // Pure a. Appl. Chem. 1974. Vol. 38. N 1—2. P. 118.
51. Frenkel S. Structure and properties of highly oriented polymer fibres // J. Polymer Sci., Polymer Symp. 1977. N 58. P. 117—149.
52. Frenkel S. On the nature of polymeric liquid crystals // J. Polymer Sci., Polymer Symp. 1974. Vol. 44. P. 49—57.
53. DiMarzio E. A. Statistics of orientation effects in linear polymer molecules // J. Chem. Phys. 1961. Vol. 35. № 2. P. 658—672.
54. Frenkel S., Baranov V. Topomorphism and phase dualism of flexible chain polymers // Brit. polym. J. 1977. P. 228—233.
55. Vilenchik L. Z., Zhmakin T. P., Belenkii B. G., Frenkel S. Ya. On the natural physical boundary between oligomers and proper and polymers in the hydrodynamics behavior of macromolecules // Acta Polymerica. 1985. Vol. B36. N 3. P. 125—130.
56. Bassett D., Khalifa B. Morphological study of chain-extended grows i polyethylene: I. Crystallization // Polymer. 1976. N 17. P. 275—284.
57. Сальников В. А. Динамическое структурообразование в бинарных расплавах полимеров: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Л., 1982.
58. Поддубный В. И., Баранов В. Г., Френкель С. Я., Леоско Е. А. Термотропное мезоморфное состояние ориентационно-закристаллизованного полиэтилена // Высокомолекулярные соединения. 1979. Т. 21Б, № 11. С. 818—820.
59. Porov V. P., Antipov E. M., Kuptsov S. A. et al. Study of the structure of oriented blends of polypropylene obtained by the method of polymerization in situ combination // Acta Polymerica. 1985. Vol. B36. N 3. P. 131—135.
60. Саддигов И. С., Бельникевич Н. Г., Коган Е. Г. и др. Влияние термодинамической жесткости цепей на продольное течение растворов полимеров // Высокомолекулярные соединения. 1982. Т. 24Б, № 9. С. 643—644.
61. Frenkel S. Ya., Vilesov A. D., Agamalyan M. M. Peculiarities of thermal motion in block copolymeric supercrystals // Acta polymerica. 1982. N 33. P. 421—425.
62. Папков С. П., Куличихин В. Г. Жидкокристаллическое состояние полимеров. М., 1977.

63. *Frenkel S. Ya., Vilesov A. D.* Multiple phase transition in block copolymers // *Macromol. Chem.* 1984. N 56. P. 93—106.
64. *Gallot B.* Ordered structures in block copolymers with segregated domains // *Pure a. Appl. Chem.* 1974. Vol. 38. N 1—2. P. 1—23.
65. *Френкель Я. И.* Кинетическая теория жидкостей. Л., 1975.
66. *Фон Барталанфи Л.* История и статус общей теории систем // *Системные исследования: Ежегодник.* 1973. М., 1973. С. 20—37.
67. *Волкова В. Н., Воронков В. А., Денисов А. А. и др.* Теория систем и методы системного анализа в управлении и связи. М., 1983.
68. *Эшби У.* Конструкция мозга. М., 1962.
69. *Фридрихсберг Д. А.* Курс коллоидной химии. Л., 1974.
70. *Заде Л. А.* Основы нового подхода к анализу сложных систем и процессов принятия решений // *Математика сегодня: Сб. науч. ст. М., 1974. С. 1—83.*
71. *Рейбиндер П. А.* Взаимосвязь поверхностных и объемных свойств растворов поверхностно-активных веществ // *Успехи коллоидной химии.* М., 1973. С. 9—16.
72. *Опарин А. И.* Материя—жизнь—интеллект. М., 1977.
73. *Биологическая кибернетика* / Под ред. Когана А. Б. М., 1972.
74. *Бриллюэн Л.* Наука и теория информации. М., 1960.
75. *Шредингер Э.* Что такое жизнь с точки зрения физики? М., 1946.
76. *Чандрасекар С.* Статистические проблемы в физике и астрономии. М., 1947.
77. *Ениколопан Н. С., Пшеченков П. А., Григоров Л. Н.* Исследование структуры приповерхностного слоя полиэтилена в полимеризационно-наполненном перлите // *Докл. АН СССР.* 1983. Т. 269. № 1. С. 140—143.
78. *Дадобаев Г., Слуцкер А. И.* Температурная зависимость искажений в кристаллах полиэтилена // *Высокомолекулярные соединения.* 1983. Т. А25. № 1. С. 8—13.
79. *Хант Э.* Искусственный интеллект. М., 1978.
80. *Шеннон К.* Работы по теории информации и кибернетике. М., 1963.
81. *Дистлер Г. И., Власов В. П., Герасимов Ю. М. и др.* Декорирование поверхности твердых тел. М., 1976.
82. *Серебровская К. Б.* Моделирование на коацерватных системах конечных этапов предбиологической эволюции // *Пробл. возникновения и сущности жизни: Сб. науч. ст. М., 1973. С. 83—108.*
83. *Booly H. L., Bungenberg de Jong H. G.* Biocolloids and their interactions. Wien, 1956.
84. *Конкин А. А.* Углеродные и другие жаростойкие волокнистые материалы. М., 1974.
85. *Turing A. M.* On computable numbers, with an application to the Entscheidungsproblem // *Proc. London Math. Soc.* 1936. Vol. N 2. P. 230—265.
86. *Turing A. M.* The chemical basis of morphogenesis // *Phil. Trans. R. Soc. London.* 1952. B237. P. 37—72.
87. *Prigogine I., Nicolis G.* Biological order, structures and instabilities // *Q. Rev. Biophys.* 1971. N 4. P. 107—148.
88. *Gierer A., Meinhardt H.* A theory of biological pattern formation // *Kybernetik.* 1972. N 12. P. 30—39.
89. *Gierer A., Meinhardt H.* Biological pattern formation involving lateral inhibition // *Lect. Math. Life Sci., The Amer. Math. Soc.* 1974. N 7. P. 163—183.
90. *Meinhardt H.* The random character of bifurcation and the reproducible processes of embryonic development // *Ann N. Y. Acad. Sci.* 1979. Vol. 316. P. 188—202.
91. *Wolpert L.* Position information and spatial pattern of cellular differentiation // *J. Theor. Biol.* 1969. N 25. P. 1—47.
92. *Трапезников А. А.* Исследование свойств адсорбционных слоев и их влияния на дисперсные системы // *Физико-химические свойства и применение поверхностно-активных веществ: Сб. науч. ст. Ташкент, 1977. С. 221—228.*
93. *Babloyantz A.* Self-organization phenomena in multiple unit systems // *Dyn. Synerg. Syst. Proc. Simp. Sinergetics.* Bielfeld, 1979. P. 180—190.
94. *Финеан Дж., Колмен Р., Мичелл Р.* Мембраны и их функции в клетке. М., 1977.

95. *Постон Т., Стюарт И.* Теория катастроф. М., 1980.
96. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. М., 1979.
97. *Ахромеева Т. С., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г.* Парадоксы мира нестационарных структур. М., 1985.
98. *Йосс Ж., Джозеф Д.* Элементарная теория устойчивости и бифуркаций. М., 1983.
99. *Касты Дж.* Большие системы // Связность, сложность и катастрофы. М., 1982.
100. *Арнольд В. И.* Теория катастроф. М., 1981.
101. *Бескерский В. А., Попов Е. Н.* Теория систем автоматического регулирования. М., 1972.
102. *Андронов А. А., Леонтович Е. А.* Некоторые случаи зависимостей предельных циклов от параметров // Уч. записки Горьков. ун-та. 1939. Вып. 6. С. 3—24.
103. *Реализация многозначных структур автоматики* / Под ред. Ракова М. А. Киев, 1976.
104. *Thom R.* Stabilité structurelle of morphogenese. N. Y, 1972.
105. *Арнольд В. И.* Особенности гладких отображений // Успехи матем. наук. 1968. Т. 23. № 1. С. 3—44.
106. *Пригожин И., Николис Ж.* Биологический порядок, структура и неустойчивости // Успехи физ. наук. 1973. Т. 109. № 3. С. 517—544.
107. *Lyubimova V. A., Frenkel S.* Autooscillating regime of sorption of low molecular weight solvent by ionomers // Polymer Bul. 1984. N 12. P. 229—236.
108. *Раков М. А.* Широкополосные преобразователи частоты на полупроводниковых триодах. Киев, 1966.
109. *Иванов В. А., Медведев В. С., Чемоданов Б. К.* и др. Математические основы теории автоматического регулирования. М., 1971.
110. *Гландорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М., 1973.
111. *Babloyanz A.* Self — organization phenomenas in biological systems // J. Theor. Biol. 1977, N 68. P. 551—561.
112. *Кирвелис Д. И., Позин Н. В.* Некоторые вопросы нейронной логики // Вопросы бионики. М., 1967. С. 163—172.
113. А. с. 647698 СССР МКИ³ G 06 G7/60. Устройство для моделирования нейрона / Кузнецова В. Л., Цыгельный И. М., Кузьменко В. Л. // Бюл. изобрет. 1979. № 6.
114. А. с. 750522 СССР МКИ³ G 06 G 7/60. Устройство для моделирования нейрона / Цыгельный И. М., Кузнецова В. Л., Кузьменко В. Л. // Бюл. изобрет. 1980. № 27.
115. *Маккалок У. С., Питтс У.* Логическое исчисление идей, относящихся к нервной активности // Автоматы. М., 1956. С. 362—384.
116. *Кузнецова В. Л., Кузьменко В. Л., Цыгельный И. М.* Задачи и перспективы развития нейронной техники // Отбор и передача информ. 1980. Вып. 62. С. 49—55.
117. *Barto A. G.* A neural network simulation method using the fast Fourier transform // IEE Trans. syst, man, cybernetics. 1976. N 12. P. 863—867.
118. *Ефимов В. Н., Клименко А. В., Богатырева Т. Н.* Качественный анализ динамических свойств нейронных сетей из адаптивных элементов // Пробл. бионики. 1977. Вып. 19. С. 3—8.
119. *Bell R. B., Hunter J. E.* Periodic majority recording and reverberatory motary // J. Theor. Biol. 1981. N 88. P. 323—332.
120. *Уатт К.* Экология и управление природными ресурсами. М., 1971.
121. А. с. 765824 СССР. МКИ³ G 06G 7/60. Устройство для моделирования нейронной сети / Кузьменко В. Л., Кузнецова В. Л., Цыгельный И. М. // Бюл. изобрет. 1980. № 35.
122. А. с. 769568 СССР. МКИ³ G 06G 7/60. Устройство для моделирования активности популяций / Кузьменко В. Л., Кузнецова В. Л., Цыгельный И. М. // Бюл. изобрет. 1980. № 37.
123. *Шмальгаузен И. И.* Организм как целое в индивидуальном и историческом развитии. М., 1982.

124. Ивахненко А. Г. Системы эвристической самоорганизации в технической кибернетике. Киев, 1971.
125. Месарович М., Такахара Я. Общая теория систем // Математические вопросы. М., 1978.
126. Саридис Дж. Самоорганизующиеся стохастические системы управления. М., 1980.
127. Игнатов В. Н., Фомин В. Н. Синтез адаптивных регуляторов на основе метода функций Ляпунова // Автоматика и телемеханика. 1982. № 6. С. 126—137.
128. Аксенов Г. С., Фомин В. Н. Синтез адаптивных регуляторов на основе метода функций Ляпунова // Автоматика и телемеханика. 1982. № 8. С. 97—103.
129. Monopoli R., Subbarac V. A new algorithm for model reference adaptive control with variable adaptation gains // IEEE Trans. Automat. Contr. 1980. Vol. 25. N 16. P. 1945—1248.
130. Расстригин П. А. Адаптация сложных систем₃/Методы и приложения. Рига, 1981.
131. Ichikawa K. An approach to the synthesis model reference adaptive control systems // Int. J. Contr. 1980. Vol. 32. N 1. P. 62—77.
132. Петров А. И., Зубов А. Г., Минин В. В. Адаптивная система с подстраиваемой стохастической эталонной моделью // Тез. докл. IX Всесоюз. совещ. по пробл. управления. Ереван, 1983. С. 165—166.
133. Эйкхофф П. Основы идентификации систем управления. М., 1975.
134. Вольтер Б. В., Ройбман Н. С. Разработка адаптивной системы управления качеством полиэтилена // Приборы и системы управления. 1978. № 10. С. 17—19.
135. Scheperdson J. C., Strugis H. E. Computability of recursive functions // J. Comput. Machinery. 1963. Vol. 10. P. 217—255.
136. Кохонен Т. Ассоциативные запоминающие устройства. М., 1982.

Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
Глава 1. ПРЕДМЕТ МОЛЕКУЛЯРНОЙ КИБЕРНЕТИКИ	5
Глава 2. МАКРОМОЛЕКУЛЫ И КОНФИГУРАЦИОННАЯ ИНФОРМАЦИЯ	12
Глава 3. САМОПРОЧТЕНИЕ КОНФИГУРАЦИОННОЙ ИНФОРМАЦИИ В СИСТЕМАХ БИОПОЛИМЕРОВ	25
3.1. Системные и информационные аспекты концепции самопрочтения	33
3.1.1. Принципы однородных вычислительных структур в молекулярной кибернетике	36
Глава 4. СПОСОБЫ ПРОЧТЕНИЯ И ТОЧКИ ОТСЧЕТА ДЛЯ КОНФИГУРАЦИОННОЙ ИНФОРМАЦИИ	39
4.1. Диаграмма Фишера для белков и ее распространение на химико-технологические проблемы	40
4.1.1. Принцип постоянства информационно-технологического параметра	44
Глава 5. САМООРГАНИЗАЦИЯ И ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ. ПОЛИМЕРНЫЕ ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ И СУПЕРКРИСТАЛЛЫ	47
5.1. Продольное течение, вынужденная анизотропия и топоморфизм гибкоцепных полимеров	53
5.2. Суперрешетки в гомодисперсных блок-сополимерах	57
5.3. Получение высокопрочных полимеров	62
Глава 6. САМООРГАНИЗАЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ	68
6.1. Негэнтропия, вероятность и молекулярные информационные машины	70
6.2. Коацерваты, морфогенез	80
Глава 7. БИФУРКАЦИЯ, УСТОЙЧИВОСТЬ, ТЕОРИЯ КАТАСТРОФ, ТЕРМОДИНАМИКА ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ	88
7.1. Некоторые исходные определения математики в приложении к теории бифуркации	88
7.1.1. Равновесные решения	90
7.2. Устойчивость	93
7.3. Аттракторы	94
7.4. Катастрофы	96
7.4.1. Катастрофа складки	99
7.4.2. Катастрофа сборки	99
7.5. Остальные катастрофы и теорема Тома	104
7.6. Открытые системы	105
7.6.1. Когерентное поведение при сорбции нономерами	111
Глава 8. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ПРИНЦИПОВ ДИССИПАТИВНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ В БИОЛОГИЧЕСКИХ И ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМАХ	113
8.1. Модели нейронов	117

8.2. Устойчивость временных диссипативных состояний нейронных ансамблей	122
8.3. Диссипативные структуры в динамике популяций	126
Глава 9. ПРЕДПОСЫЛКИ КИБЕРНЕТИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ	131
9.1. Системное представление технологического процесса	132
9.2. Адаптивные и самонастраивающиеся системы управления технологическими процессами	142
Глава 10. АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ МАШИНА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ СОСТОЯНИЯ ОБЪЕКТА	145
10.1. Работа алгоритмической машины в режиме формирования кластера признаков	149
10.2. Ассоциативное считывание информации	156
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	160

Монография

ФРЕНКЕЛЬ Сергей Яковлевич
ЦЫГЕЛЬНЫЙ Игорь Михайлович
КОЛУПАЕВ Борис Сергеевич

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ
КИБЕРНЕТИКА**

Художественное оформление О. Э. Юдиной
Художественный редактор В. Д. Цейтин
Технический редактор И. Г. Федас
Корректоры М. Т. Ломеха,
Е. Г. Логвиненко

ИБ № 13145

Сдано в набор 28.11.89. Подп. в печать 17.04.90.
БГ 02691. Формат 60×90/16. Бум. для мас. изд. Лит.
гарн. Выс. печать. Усл. печ. л. 10,5. Усл. кр.-от:
10,87. Уч.-изд. л. 10,78. Тираж 1000 экз. Изд. № 1823.
Заказ 2016. Цена 2 р. 40 к.

Издательство «Свит»
при Львовском госуниверситете.
290000 Львов, ул. Университетская, 1.

Львовская областная книжная типография.
290000 Львов, ул. Стефаника, 11.

