

ЕКОЛОГІЯ І ТЕХНОГЕННА БЕЗПЕКА

УДК 621.72

Ю.В. Загородній, к.т.н., докторант
Київський університет ім. Т.Шевченка

СТВОРЕННЯ КОМП'ЮТЕРНОЇ СИСТЕМИ МОДЕЛЮВАННЯ НЕГАТИВНОГО ВПЛИВУ ФІТОВІРУСІВ НА РОЗВИТОК РОСЛИН

Розглядається структура комп'ютерного симулятора поведінки фітовірусів в різних екологічних умовах, що містить в собі математичні моделі розвитку рослини та репродукції вірусів, апарат проектування необхідних умов середовища, апарат розв'язування прикладних задач оптимізації.

1. Структура комп'ютерної системи "Virus 2000"

Для створення адекватних і гнучких методів дослідження властивостей поведінки вірусів за допомогою комп'ютерного моделювання був побудований пакет програм "Virus 2000". Така комп'ютерна система містить математичну модель поведінки вірусів (МПВ), а також програмний пакет дослідження (ППД), що є гарним інтерфейсом між моделлю та науковцем, який може використовувати його для своїх досліджень. Комп'ютерний симулятор імітує поведінку вірусу жовтої мозаїки квасолі, базуючись на створеній моделі. В комп'ютерній системі присутні такі модулі:

- 1) Імітатор. Цей модуль, використовуючи МПВ і спеціально форматовані файли екологічних умов, може імітувати розвиток біологічного організму рослини та інфекційної хвороби під впливом цих умов. Таким чином, результатом такої симуляції є повне та зручне відображення найбільш важливих характеристик розвитку рослини.
- 2) Модуль середовища. За допомогою цього модуля дослідник може імітувати різні умови навколишнього середовища, в яких він хоче досліджувати розвиток інфекційної хвороби.
- 3) Модуль оптимізації. Цей модуль може розв'язувати задачі оптимізації. Наприклад, знаходження таких умов навколишнього середовища, при яких обраний штам вірусу має мінімальну інфекційну силу.

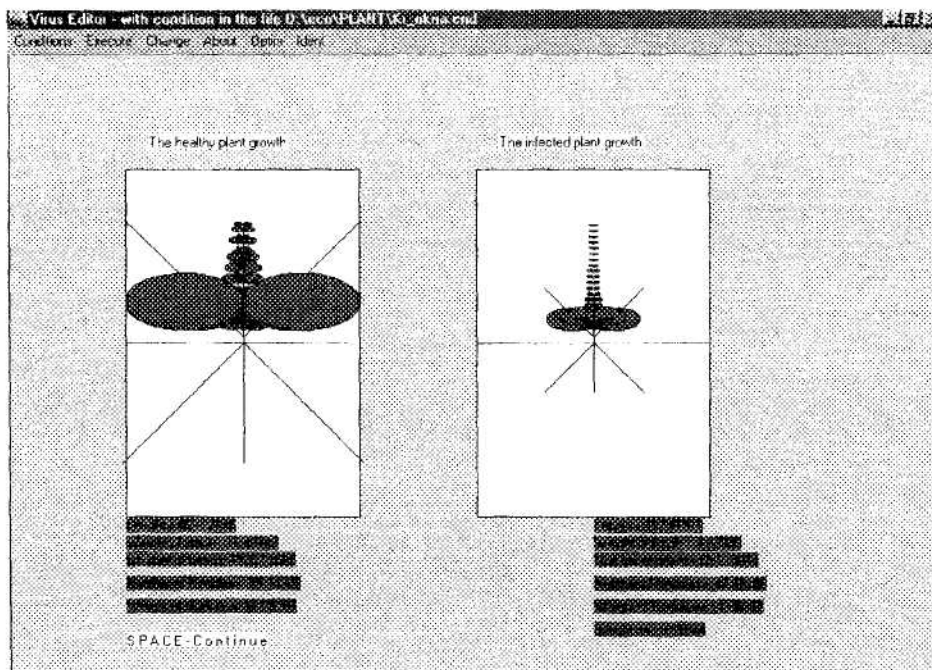


Рис. 1. Вікно роботи комп'ютерної системи "Virus 2000". Після обрахування змінних стану розвитку здорової та інфікованої рослини система схематично відобразила їх розвиток для науочного порівняння

За допомогою комп'ютерної системи "Virus 2000" можна:

- 1) Симулювати поведінку різних вірусів в різноманітних умовах навколишнього середовища за допомогою побудованої моделі відповідних біологічних процесів;
- 2) Знаходити оптимальні екологічні умови для розвитку інфікованих рослин при мінімальній втраті врожаю;
- 3) Досліджувати такі зміни навколишнього середовища за допомогою відомих закономірностей поведінки вірусів.

У майбутньому:

- 1) Мати велику базу даних властивостей відомих вірусів та відносити нові штами вірусів до певної групи;
- 2) Зберігати та використовувати інформацію про відомі та нові штами вірусів;
- 3) Досліджувати вплив зміни умов середовища на розвиток вірусів (вірус як індикатор екологічного стану);
- 4) Проводити інші дослідження.

2. Математична модель поведінки вірусів (МПВ)

Математичне моделювання механізмів біологічної еволюції – це, в першу чергу, моделювання механізмів саморегуляції та дії обернених зв'язків на основі чисельного обчислення і математичної формалізації з ефективним використанням сучасної обчислювальної техніки [9, 11, 13, 52].

Для моделі характерна наявність фазових змінних, що описують стан елементів досліджуваної системи (вектор X), незмінних параметрів, які характеризують у рівняннях моделі певні закономірності зміни значень фазових змінних (вектор P), а також в модель включаються змінні, які характеризують стан середовища, що оточує об'єкт дослідження (вектор E). Серед фазових змінних є змінні стану, значення яких характеризують стан елементів системи, що моделюється; змінні швидкості, які характеризують процеси, що моделюються (наприклад, активність фотосинтезу, темп росту організму тощо); є допоміжні змінні, введення яких дає більш глибоке розуміння об'єкта дослідження. Наприклад, якщо у моделі є змінні стану – маса рослини M та площа поверхні листя L , тоді можна утворити допоміжну змінну T , $T = M/L$, яка буде індексом поверхні листя.

Моделі підрозділяються на динамічні та статичні. У динамічних моделях змінні стану – це функції від часу: $X = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)\}$. Тобто характеристики об'єкта, що досліджується за допомогою моделі, змінюють динамічно своє значення. Серед динамічних моделей є клас дискретних моделей, в яких аргумент часу змінюється за кроком $t = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. У них зміни значень змінних стану записуються таким чином:

$$X^{k+1} = F(X^k, P, E^k), \quad (1)$$

де k – крок часу, а X^k , і E^k – множини значень відповідно змінних стану моделі та змінних середовища у момент часу k . Питанням в побудові таких моделей є вигляд функції $F(0)$, який би адекватно описував поведінку об'єкта дослідження, а отже, вигляд рівнянь (1).

Такі рівняння для моделі розвитку здорової чи інфікованої рослини мають вигляд:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \sum_{j=1}^{n_p} a_{ij} m_j(X^k, P, E^k), \quad (2)$$

де x_i^k – значення i -ї компоненти вектора стану на кроці k ; $m_j(X^k, P, E^k)$ – реальна інтенсивність процесу j , що проходить у рослині при певних значеннях змінних стану (X) та середовища (E); n_p – кількість процесів, що проходить у рослині; a_{ij} – коефіцієнт витрати речовини X_i у процесі j (якщо $a_{ij} < 0$) чи коефіцієнт прибутку речовини (якщо $a_{ij} > 0$).

Отже, крім вищезгаданих компонентів, у модель входить і вектор процесів $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_{n_p}\}$. Кожному процесу $q_j \in Q$ ставимо у відповідність **функцію потенційної сили процесу** – $F_j(X, E)$ як деяку додатньо-визначну функцію від множини змінних стану та змінних середовища. Тоді для кожної змінної стану $x_i \in X$, що характеризує концентрацію деякої речовини, кількість витрат на процес q_j визначається таким співвідношенням:

$$r_{ij} = \begin{cases} -a_{ij} F_j(X, E), & a_{ij} < 0, \\ 0, & a_{ij} \geq 0. \end{cases} \quad (3)$$

Функція повної витрати речовини x_i тоді прийме вигляд:

$$R_i(X, E) = a_{i0} + \sum_{j=1}^{n_p} r_{ij}, \quad (4)$$

де величина a_{i0} характеризує потенційне зберігання речовини x_i від витрати у процесах.

Функцією реальної сили процесу q_j є:

$$m_j = \min_{x_i, x_j > 0} \frac{r_{ij}}{a_{ij} R_x(X)} \quad (5)$$

Можна показати, що при перерахунку моделі за допомогою співвідношення (2) виконуються такі умови:

- 1) Сума всіх реальних витрат речовини x_i на всі процеси моделі менша за значення x_i , коли $a_{i0} > 0$, і дорівнює значенню x_i , коли $a_{i0} = 0$;
- 2) Якщо речовина x_i витрачається в процесі q_j і $x_i = 0$, тоді $m_j = 0$;
- 3) Якщо до множини процесів моделі Q додати ще один процес q_v , який використовує ті ж речовини, що і процес q_j моделі (наприклад, процес вірусної репродукції), тоді реальний параметр процесу q_j зменшується;
- 4) Зростання потенційного параметра процесу при перерахунку моделі ($X^k \rightarrow X^{k+1}$) веде до зростання реального параметра цього процесу.

При такому підході до моделювання процесів розвитку організму можна доповнювати та розвивати вже побудовані моделі, деталізуючи математичний опис окремих процесів.

Кожен рослинний організм має ознаки та властивості, що характеризують біологічну систему: морфологія, обмін речовин, ріст, розвиток, мінливість, спадковість [3, 7, 10]. Ріст та розвиток рослини безпосередньо пов'язаний з процесами живлення, балансу водного режиму, фотосинтезу ($\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2$), диханням ($\text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{енергія}$), взаємодії всіх частин цілого організму [3].

В моделі розглядаються такі змінні стану:

X_1 -[H₂O] – концентрація води у рослині; X_2 -[CO₂] – концентрація вуглекислоти; X_3 -[O₂] – концентрація кисню; X_4 -[АТФ] – концентрація молекул АТФ; X_5 -[CH₂O] – концентрація вуглеводів; X_6 -[Vі] – концентрація вірусу; X_7 -[NH] – концентрація аміних сполук; X_8 -[X] – загальний показник розвитку хлоропластів; X_9 -[M] – загальний показник розвитку мітохондрій; X_{10} -[N] – загальна кількість бульбашок у бобовій рослині; X_{11} – РН рослини; X_{12} -[NH₂] – концентрація водню у бульбашках; X_{13} -[NV] – концентрація вуглеводів; X_{14} -[NH⁺] – концентрація протонів; X_{15} -[NATP] – концентрація АТФ; X_{16} -[N₂] – концентрація фіксованого азоту; X_{17} [NNH] – концентрація аміних сполук у бульбашках; X_{18} -[S] – загальний показник розвитку бульбашок; X_{19} -[G] – загальна вага бульбашок; X_{20} -[NE] – концентрація вільних електронів у бульбашках; X_{21} -[NO₂] – концентрація кисню у бульбашках; X_{22} -[I] – інфекційність вірусу (кількість некрозів на 10 листках); X_{23} -[C] – показник розвитку стебла; X_{24} -[K] – показник розвитку коріння; X_{25} -[B] – показник утворення бобів.

Змінні стану середовища: e_1 -[T] – температура повітря; e_2 -[L] – освітлення; e_3 -[V] – вологість ґрунту; e_4 -[PЗ] – радіаційне забруднення; e_5 -[PH] – рівень PH ґрунту; e_6 -[NG] – концентрація мінеральних добривів; e_7 -[ПЗ] – рівень промислового забруднення.

Всі змінні у моделі нормовані. Тобто, для кожної змінної є максимальне можливе значення, на яке ділиться справжній показник, щоб утворити нормований показник.

В моделі розглядаються такі процеси:

Процес	Функція потенційної сили
0. Репродукція вірусу	$F_0 = p_{26}x_6 / (1 + p_4^*x_{23}^*x_{24})$
1. Побудова хлоропластів	$F_1 = (1 - T(x_5))x_{23}$
2. Побудова мітохондрій	$F_2 = (1 - T(x_4))(x_{23} + x_{24})$
3. Фотосинтез	$F_3 = x_8e_1e_2S$
4. Фосфорування	$F_4 = x_9e_1S$
5. Ріст стебла	$F_5 = [1 - (T(x_2) + T(x_4) + T(x_5) + T(x_{23}))/4]e_1S$
6. Ріст кореня	$F_6 = [1 - (T(x_1) + T(x_4) + T(x_{24}))/3]e_1S$
7. Утворення бобів	$F_7 = x_{23}$
8. Обмін "рослина – повітря"	$F_8 = x_{23}(1 - T(x_2))e_1$
9. Деструкція вірусу	$s = p_{19} + p_{20}^*e_4 + p_{27}x_{11}$ $F_9 = x_6s / (1 + s)$
10. Деструкція хлоропластів	$s = p_{21}^*e_4 + p_{22}e_7$ $F_{10} = x_8s / (1 + s)$
11. Деструкція мітохондрій	$s = p_{21}^*e_4 + p_{22}e_7$

	$F_{11} = x_9s/(1 + s)$
12. Поглинання води	$F_{12} = e_3x_{24}(1 - T(x_1))$
13. Обмін "бульбашки – рослинам"	$F_{13} = (1 - T(x_7))x_{17}$
14. Поглинання амінів	$F_{14} = \max\left\{\frac{e_6 - Nr}{1 + e_6 - Nr}(1 - x_7), 0\right\}$
15. Обмін "рослина – бульбашкам"	$F_{15} = x_{24}(1 - x_7)S$
16. Ріст бульбашок	$F_{16} = x_{15}x_{13}x_{24}$
17. Ріст ваги бульбашок	$F_{17} = x_{18}$
18. Розрив водню в бульбашках	$F_{18} = x_{12}x_{18}$
19. З'єднання протонів в бульбашках	$F_{19} = x_{14}$
20. Азотофіксація	$F_{20} = x_{18}(1 - T(x_{17}))$
21. Фосфорування в бульбашках	$F_{21} = x_{18}$
22. Поглинання протонів рослиною	$F_{22} = x_{24}(1 - T(x_{11}))\exp(-2,3e_5)$
23. Ріст інфекційності рослини	$F_{23} = x_6$
24. Поглинання протонів в бульбашках	$F_{24} = x_{18}(1 - T(x_{14}))\exp(-2,3e_5)$
25. Обмін "бульбашки – ґрунт"	$F_{25} = x_{18}$
26. Вихід кисню	$F_{26} = F_8 * x_3$
27. Процес відновлення	$F_{27} = x_{22}x_{23}e_{1S}$

$$T(x) = \begin{cases} x, & \text{if } x < 0,99, \\ 0,99, & \text{if } x \geq 0,99. \end{cases}$$

Міра витрачання речовин рослини на розвиток бульбашок:

$$F^N = \frac{(1 - [NH])[K]R_1d}{1 + [NN]}$$

де d – відносна міра дня розвитку рослини: $d(k) = k/80$, якщо вегетаційний період 80 діб.

S – показник старіння рослини. Він може бути представлений такою формулою:

$$S^k = e^{-0,00323k}$$

Після визначення суми загальних витрат всіх речовин треба приступати до знаходження значення функції реальної сили для кожного процесу, використовуючи формулу (5). Залишилося лише надати значення елементам матриці $A = \{a_{ij}\}$. Вони визначаються через використання відомих закономірностей розвитку рослини. Наприклад, для процесу фотосинтезу масмо:



Тобто, $a_{13} = -1$, $a_{23} = -1$, $a_{33} = 1$, $a_{35} = 1$; $a_{3i} = 0$ для інших змінних стану.

Початкові дані моделі: $[H_2O]^0 = d^0H^{\max}$, $[O_2]^0 = d^0O^{\max}$, $[ATP]^0 = d^0A^{\max}$, $[CH_2O]^0 = d^0O^{\max}$, $[Vi]^0 = V^0$, $[NNH]^0 = d^0N^{\max}$, інші дорівнюють нулю.

У моделі реальні концентрації речовин представлені у молях, а у систему рівнянь вони входять з відносними величинами: $[H_2O]^0 = [H_2O]^0/H^{\max}$, $[CO_2]^0 = [CO_2]^0/H^{\max}$, $[ATP]^0 = [NATP]^0 = [ATP]^0/A^{\max}$, $[CH_2O]^0 = [NV]^0 = [O_2]^0 = [NO_2]^0 = [\text{концентрація}]^0/O^{\max}$, $[NH]^0 = [NNH]^0 = [NH_2]^0 = [NN]^0 = [\text{концентрація}]^0/N^{\max}$.

3. Результати роботи комп'ютерного симулятора

Була проведена ідентифікація моделі на даних натурних спостережень за розвитком бульбашкової азотофіксації на рослинах квасолі як здорових, так і уражених вірусом жовтої мозаїки [1, 10]. Спостереження проводилися під час вегетаційного періоду у 1991, 1992, 1993-х роках у 7 регіонах України. При цьому в модель бралися дані кількості та загальної маси бульбашок у здорових та хворих рослин, а також – інфекційність вірусу. Отримані конкретні значення параметрів моделі.

Так, для регіону, де середні показники середовища такі: $[T] = 24-25$ °C; $[L] = 40$; $[V] = 38-35$ %; $[PЗ] = 0,5$; $[PH] = 7,0$; $[NG] = 555(10 \text{ кг.га})$; $[ПЗ] = 0,5$, система відгукнулася динамікою всіх змінних стану, що наведена на рис. 2.

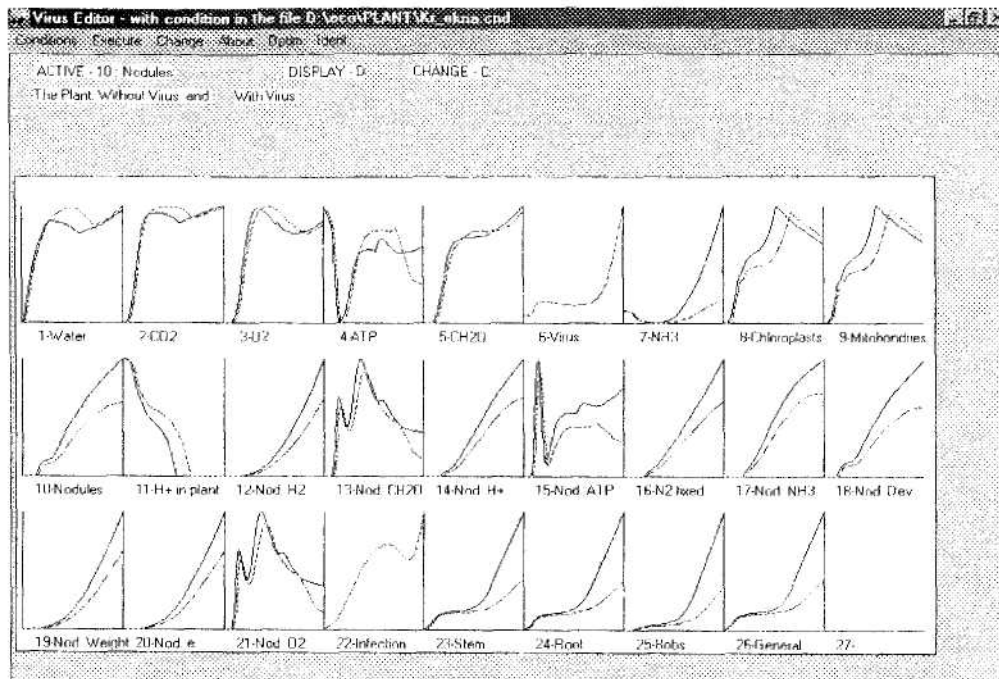


Рис. 2. Динаміка розвитку значень усіх змінних стану моделі за вегетаційний період при означених факторах навколишнього середовища

Таким чином, за допомогою створеного механізму побудови моделей розвитку рослин можна проводити дослідження впливу процесу вірусної репродукції на загальний стан організму при різних екологічних умовах, оперуючи представленими залежностями. За допомогою такого підходу побудовано математичну модель розвитку рослини та бульбашкової азотофіксації при вірусній інфекції в заданих умовах навколишнього середовища.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Бойко А.Л. Экология вирусов растений. – К.: Вища школа, 1990. – 116 с.
2. Гачок В.П., Шохин А.С. Кинетическая модель биохимической азотофиксации. – К.: Институт теор. физики, 1985. – 32 с.
3. Гелстон А., Девис П., Сэттер Р. Жизнь зеленого растения. – М.: Мир, 1983. – 552 с.
4. Грон Д. Методы идентификации систем. – М.: Мир, 1979. – 304 с.
5. Загородній Ю.В., Бейко І.В., Бойко А.Л. Математичне моделювання дії постійного магнітного поля на вірус тютюнової мозаїки та на рослину клітину // Допов. НАН України, 1995. – № 5. – С. 131–132.
6. Зуев С.М. Математические модели заболеваний и анализ экспериментальных данных. – М.: Наука, 1984. – 120 с.
7. Ковальский А.Л. Биогеохимия растений. – М.: Мир, 1984. – 350 с.
8. Коць С.Я. Взаимосвязь процессов азотофиксации, фотосинтеза и дыхания у люцерны // Физиология и биохимия культурных растений, 1994. – Т. 26. – № 3. – С. 455–462.
9. Шенон Р. Имитационное моделирование систем. Искусство и наука. – М.: Мир, 1978. – 418 с.
10. Yu. Zagorodni, A. Boyko, I. Beiko, S. Skrygun Construction of Computer Simulation of Critical Plants State Under Influence of Phytoviruses Infection and Ecological Unstability // Papers of 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin / Germany, August, 1997.

ЗАГОРОДНІЙ Юрій Віталійович – кандидат технічних наук, докторант факультету кібернетики Київського університету імені Тараса Шевченка.

Наукові інтереси:

- комп'ютерне моделювання природних і економічних систем;
- задачі оптимального керування екологічними і технічними процесами;
- системологія.

Подано 24.12.1999.