

УДК 577.121:004.652.4

Вігер А.В., Загородній Ю.В. (Україна, Київ)

ЕКОЛОГІЧНА ЛАБОРАТОРІЯ IN SILICO: ІДЕЯ СТВОРЕННЯ. КОНЦЕПЦІЯ КОМПРКОВОЇ МОДЕЛІ ЕКОСИСТЕМНОГО ОБМІНУ РЕЧОВИН

Для позначення комп'ютерних імітацій дійсності нерідко вживають слово «віртуальний», хоча точнішим є термін «in silico». Набуло поширення in silico-природознавство [1].

Зважаючи на усвідомлення людством проблем природокористування, якщо не сьогодні, то в недалекому майбутньому людство постане перед питанням обґрунтованого керування екосистемами, зокрема обміном речовин у них, а в подальшому й біосферою всієї планети.

Одним із невід'ємних моментів на шляху до комп'ютеризації великомасштабного природокористування (аналогічної глобальній комп'ютеризації фінансових, транспортних, технологічних й інших систем) є організація арсеналу програмних засобів у вигляді умовно названої «Екологічної лабораторії in silico» (EJS).

1. Концепція «екологічної лабораторії in silico»

Зважаючи на те, що сучасна екологія використовує знання численних галузей природознавства та гуманітарних дисциплін, у нашому уявленні EJS повинна мати вигляд пакету спеціалізованого програмного забезпечення з різних розділів природознавства, що працюють злагоджено. Втілення EJS можна здійснити за участі вчених багатьох країн протягом десятиліть.

Пакет EJS можна представити у вигляді трьох ядер програм. Перше – це загальнонаукові програми для статистичної роботи з даними, математичного аналізу, креслення і подібного. До складу другого, найважливішого ядра, повинно входити спеціалізоване програмне забезпечення з низки фундаментальних галузей природознавства, на основі яких і складається повноцінна сучасна екологія. Третє ядро – це підбірка допоміжних засобів із біологічної систематики і морфології організмів, технологічних відомостей, поточних гідрометеорологічних даних.

Для її ефективної роботи потрібно уніфікувати форму подачі знань у електронних базах, здійснити копівку роботу із заповнення прогалін між зібраними програмами і створення нових алгоритмів для екологічних вивчень – надбудови, що забезпечувала б оперування над трьома ядрами програмного забезпечення: «інтерпретатори», засоби обміну інформацією та її пошуку.

Передумовою для роботи багатьох електронних інформресурсів (напр.: Reactome, HumanCyc, BioCyc, BioCarta, KEGG [2, 3] є доволі обмежена кількість метамов, що дозволяють представити біологічні знання EOM у стандартизованому вигляді (для спрощення назовемо їх «машинними мовами»): PSI MI, BioPAX, CellML та її послідовниця – мова SBML, а для представлення ж біологічних знань у вигляді діаграм була розроблена система правил «Графічні позначення для потреб системної біології» - SBNG. Основою для машинних мов є мови описової логіки.

На наш погляд, перелічені досягнення обчислювальної біології не дозволяють моделювати метаболізм екосистем як явище: 1) від початку створення не були передбачені для таких цілей; 2) навіть схожа інформація нерідко розосереджена по-різних ресурсах. Слушною є розробка нових стандартів відображення інформації для моделювання обміну речовин в екосистемах.

2. Концепція обміну речовин у екосистемах

Метаболізм екосистеми є складним виробництвом, у якому різні хімічні та біохімічні перетворення найкраще проходять за відмінних умов, обставин. Виходячи з цього, іноді говорять про компартиментування метаболізму в екосистемі [4]. Ми визначаємо компартиментування екосистемного метаболізму як явище неоднаковості умов, потрібних для проходження окремих реакцій або ланок обміну речовин. У нашому розумінні це явище може виникати з трьох причин: 1) просторової; 2) часової; 3) генетичної.

а) найважливіші риси понятійного апарату моделювання екосистемного обміну речовин

Чітке визначення понятійного апарату є важливим моментом сучасних метамов, призначених для представлення біологічних знань обчислювальним машинам. Найзагальніші поняття ще називають сутностями (англ. entities). Розгляд обміну речовин як екосистемного явища слугував засобом певної адаптації існуючих стандартів [5, 6] для поставлених нами завдань, а отже ми вживаємо наступні визначення найважливіших понять для моделей метаболізму екосистем:

ПАРАМЕТР – будь-який атрибут (ознака) моделі або певної СУТНОСТІ, що входить до складу моделі. Атрибути можуть бути як реальними, так і службовими, як наприклад посилання на роботу, в якій було опубліковано ту чи іншу відомість. Як правило, під параметрами ми розуміємо саме реальні атрибути.

СУТНІСТЬ – об'єкт описання матеріального або процесуального характеру, яким оперують у моделі.

ПРОЦЕС – по-перше, будь-яка дія виконана з УЧАСНИКАМИ біосистеми або ними самими; по-друге, зміна ПАРАМЕТРІВ біосистеми або її УЧАСНИКІВ. Характерною ознакою процесу є його тривалість.

ПОДІЯ – різновид ПРОЦЕСУ, якому притаманні визначені часові межі.

УЧАСНИК – матеріальна структурна одиниця будь-якого рівня складності в біосистемі; від його наявності, відсутності або чисельності залежить існування або окремі ПАРАМЕТРИ інших учасників біосистеми, тобто якщо матеріальний об'єкт у моделі абсолютно індиферентний відносно інших учасників, то він уже не підпадає під це визначення. Учасниками можуть бути різні за розмірами і складністю об'єкти: від електронів і йонів до популяцій та екосистем, підпорядкованих основній системі.

ЗАЛЕЖНІСТЬ – зв'язок визначеного логічного типу між двома і більше сутностями або параметрами.

З нашої точки зору, з метою створення комп'ютерних моделей сутності, що стосуються явища метаболізму, можна класифікувати так. **1-а категорія:** учасники метаболізму. Типи учасників: 1) елементарні учасники (електрони; молекули; йони; кванти енергії); 2) учасники більш високих рівнів ієрархії – вони складаються учасників попереднього типу; 3) фізичні фактори. **2-а категорія:** процеси метаболізму. Типи: 1) мікрофізичні процеси (явища на рівні атомів, молекул та невеликих груп молекул без зміни первинної будови речовин); 2) власне хімічні перетворення (ті, в яких змінюється первинна будова речовини); 3) макрофізичні процеси (ті, в яких всі молекули, йони однієї речовини розглядаються суто статистично (як у молекулярно-кінетичній теорії), а не окремо).

б) ієрархія учасників та процесів в екосистемах

Екологія має справу з різними рівнями організації живого світу: від окремих біомолекул до біосфери в цілому. Щодо вивчення обміну речовин в екосистемах доцільно виділити три найважливіші рівні: 1) клітинний; 2) організму та 3) екосистеми (хоча, безперечно, поза ними та між ними існують й інші рівні). Саме на цих трьох рівнях, з нашої точки зору, і з'являються головні ознаки та емерджентні для метаболізму властивості.

Повноцінними дискретними одиницями на рівні клітини є молекули; на рівні багато-клітинного організму до молекул додаються клітини; на рівні екосистеми до цих двох одиниць додаються організмом. Найголовнішими структурними складовими, що підлягають класифікації на рівні екосистеми виступають молекули й органоїди; на рівні багатоклітинного організму – клітини, тканини, органи та системи органів; на рівні екосистеми – організми, популяції, угруповання, а для регіонів біосфери – це також екосистеми рівня окремих угідь, біотопів, біохорів, біоциклів. За просторовим та генетичним факторами (причинами) компартаментация обміну речовин проявляється на рівні клітини між спеціалізованими клітинними компартаментами та між мембранами, що оточують їх; на рівні багатоклітинного організму – між спеціалізованими клітинами, між спеціалізованими тканинами, між органами та між системами органів; на рівні екосистеми – між спеціалізованими організмами, а також між позаорганізменними середовищами.

Ієрархія притаманна не тільки учасникам екосистемах, але й життєвим процесам у них: проходження процесів складних рівнів можливе тільки завдяки простішим процесам. Пропонуємо розглядати процеси, пов'язані з діяльністю живих організмів, у такому порядку: (взаємодії на молекулярному рівні, хімічні перетворення; макрофізичні процеси)→(шляхи сприйняття та передачі сигналу; метаболічні шляхи)→(ріст окремих клітин і цикли розвитку окремих клітин та вірусів)→(гістогенез)→(органогенез)→(ріст і розвиток багатоклітинних організмів)→(зміни в популяціях; еволюційні процеси; процеси впливу на неживе середовище).

в) про процеси перенесення

В геохімії переміщення мас речовин найчастіше називають міграцією, а в біології – транспортом; ми вважаємо, що доцільно вживати більш семантично повне слово – перенесення.

Можна запропонувати три відносно незалежні один від одного критерії класифікації перенесення речовин у біосфері. **Перший** – за опором середовища, через яке переміщуються речовини. Середовища а) не чинять істотного опору переміщенню; б) виступають бар'єрами. **Другий** – за напрямом руху речовини відносно вектора зміни її концентрації. Речовина може рухатися а) в сторону більш низької концентрації (це зазвичай пасивний рух); б) більш високої – такий рух потребує затрат енергії ззовні. **Третім** критерієм є участь переносників: а) переміщення мас проходить без участі додаткових матеріальних агентів; б) для переміщення потрібна участь переносників різного рівня складності: від молекул до багатоклітинних організмів.

г) принципи участі факторів і агентів у живій природі

Функціонування живої природи залежить від двох принципово відмінних за характером участі груп факторів і агентів фізичної, хімічної або біотичної природи. Перша група – це ресурси [7], джерела енергії та будівельних матеріалів [8], або метаболіти [9]; до другої належать умови [7], медіатори інформації [8], або подразники [9]. Відмінність між цими двома групами полягає в тому, що в першому випадку відповідь біосистеми пропорційна величині дії того чи іншого стимулу, в другому – в результаті медіаторної дії певного порогового (переважно невеликого) рівня стимулу розвивається відповідь тригерно-каскадного характеру. Наведемо приклади (табл. 1).

Таблиця 1. – Варіанти характеру та природи дії факторів і агентів у живій природі

Природа	Характер дії факторів й агентів	
	Ресурсний	Медіаторний
Фізична	Світло, тепло для фотосинтезу.	Окремі кванти світла для реакцій з участю фітохромів або зорових пігментів.
Хімічна	Основні нутрієнти для будь-яких організмів.	Нейромедіатори.
Біотична	Мутуалістичні, конкурентні взаємовідносини, хижацтво і т. п.	Відносно мала кількість переносника патогена, наприклад, вірофорної комахи. Цей патоген може, спричиняючи пандемії, панзоотії або панфітотії окремих видів, радикально змінювати структуру біоценозу, а це в свою чергу може викликати зміну ландшафту.

3. Коміркова модель обміну речовин у екосистемі

Просторова і часова неоднорідність екосистеми забезпечує належне здійснення в ній щомиттєвої роботи. В екосистемі поряд із плавним (градієнтним) переходом від одних умов до інших спостерігаються також і різні за розмірами ділянки простору, що характеризуються більш менш однаковими умовами і водночас помітно відрізняються від сусідніх ділянок простору – має місце дискретна зміна факторів.

Ми пропонуємо розробляти коміркову модель екосистеми – один із арсеналу засобів ЕІС. Згідно з цією моделлю екосистему можна вважати просторово дискретною – такою, що складається з певної (досить великої) кількості видів комірок, іншими словами компартментів. Кожна комірка – це сукупність точок у визначеній обмеженій частині простору, на які однаково впливають фактори середовища, що зумовлюють перебіг певних хімічних та фізико-хімічних процесів. За нашим задумом, коміркова модель екосистеми являє собою множину комірок різного роду, які змінюються в часі, розміщуються та переміщуються в просторі у визначеному порядку – за певними законами.

Кожній із комірок у моделі екосистеми присвоюються внутрішні та зовнішні атрибути (вхідні параметри). До внутрішніх належать: 1) Вид компартменту, 2) Положення та форма компартменту, що описуються за допомогою його координат відносно умовної точки відліку або відносно інших компартментів. Згідно задуму, зазначення координат об'єктів у процесі створення моделі – процедура необхідна для виконання обчислювальною машиною багатьох операцій вже при запуску моделі, зокрема пов'язаних із розрахунками перенесення речовин. 3) Хімічний склад комірки, точніше особливості хімічного складу, що відрізняють дану комірку від хімічного складу базової моделі комірок цього виду.

Зовнішніми вхідними параметрами комірок є: 1) час; 2) зовнішні фізичні фактори (температура, вологість, освітлення та ін.); 3) зовнішні хімічні фактори – концентрації речовин, які неможливо передбачити як результат попередньої діяльності самого організму.

До первинних, але разом із тим найголовніших питань, на які повинна давати відповідь комп'ютеру і досліднику коміркова модель метаболізму, належать:

- 1) Чи принципово може відбуватися у зазначений час реакція у зазначеному компартменті?
- 2) Якщо проходження реакції за зазначених умов принципово можливе, то чи є реакція термодинамічно вигідною за заданого хімічного складу компартмента?
- 3) Якщо за заданих умов реакція термодинамічно вигідна, то яка кінетика її проходження за притаманних компартменту внутрішніх і заданих факторів зовнішнього впливу – як інтенсивно і до яких пір може проходити реакція.

Без відповіді на ці питання неможлива постановка більш складних задач.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Henry C.M., Washington C., Washington E.N. System biology: Integrative approach in which scientists study pathways and networks will touch all areas of biology, including drug discovery // Chemical and Engineering News. – 2003. – Vol. 81, Issue 20. – P. 45-55.
2. Novère N., Bornstein B., Broicher A., Courtot M., Donizelli M., Dharuri H., Li Lu, Sauro H., Schilstra M., Shapiro B., Snoep J.L., Hucka M. BioModels Database: a free, centralized database of curated, published, quantitative kinetic models of biochemical and cellular systems // Nucleic Acids Research. – 2006. – Vol. 34, Database issue. – P. D689-D691.
3. <http://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/>.
4. Guglielmo F., Lammel G., Maier-Reimer E. Global environmental cycling of gamma-HCH and DDT in the 1980s – a study using a coupled atmosphere and ocean general circulation model // Chemosphere. – 2009. – Vol. 76, No 11. – P. 1509-1517.
5. Strömbäck L., Lambrix P. Representations of molecular pathways: an evaluation of SBML, PSI MI and BioPAX // Bioinformatics. – 2003. – Vol. 21, No 24. – P. 4401-4407.
6. http://sbml.org/SBML_Software_Guide/SBML_Software_Matrix/.
7. Бигон М., Харпер Дж., Таунсенд К. Экология: Особи, популяции и сообщества: В 2-х т. / Пер. с англ. В.Н.Михеева и М.А.Снеткова. – М.: Мир, 1989. – Т. 1. – 667 с.
8. Остроумов С.А. Введение в биохимическую экологию. – М.: Издательство Московского университета, 1986. – 176 с.
9. Александров В.Я. Реактивность клеток и белки. – Л.: Наука, 1985. – 317 с. – 8 ил.

УДК 628.17:658.26:681.5

Семенюта О.М., Квітка О.О., Шахновський А.М. (Україна, Київ)

ОБ'ЄКТНО-ОРІЄНТОВАНЕ ПРОЕКТУВАННЯ ОПТИМАЛЬНИХ СХЕМ ВОДОСПОЖИВАННЯ

Автоматизоване проектування схеми водного господарства промислових підприємств як складової частини хімико-технологічної системи передбачає організацію розрахунків щодо створення нової або модернізації існуючої схеми водного господарства, зокрема, шляхом застосування методів структурної оптимізації.