

Математические модели и численные методы в биоинформатике

О МЕТОДАХ СОЗДАНИЯ И АНАЛИЗА МОДЕЛЕЙ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Тращев Р.В.

Институт фундаментальных проблем биологии РАН, г. Пущино

Люлякин О.П., Саранча Д.А., Юрезанская Ю.С.

Вычислительный центр им. А.А.Дородницына РАН, Москва

- *В данной работе, с помощью методов математического моделирования, решается задача формулирования гипотез о ведущих механизмах, определяющих колебания численности тундровых животных.*
- *Решение этой задачи основано на комплексных исследованиях, включающих в себя полный набор операций – от отбора биологической информации до построения набора взаимосвязанных моделей.*

- Как проводить моделирование – это знают все.
- Нужно собрать с помощью экспертов идеально выверенное описание всех механизмов, формирующих модель.
- И такая модель должна воспроизвести зарегистрированную динамику численностей.
- Так не получается.
- Выверенные данные ничего не гарантируют.

- Приходится строить модель когда ряд ведущих механизмов исследованы слабо. (Для леммингов – нет регистраций в подснежный период – один из важнейших периодов. Есть только косвенные оценки. Динамика численности регистрируется не на «усредненный гектар», а там где животных много, т.е в оптимальном биотопе и т.д.)
- Основной постулат – долговременное существование популяции (сообщества).
- Ведущий экспериментальный факт – сравнительно стабильные колебания численности животных.

- И тем не менее моделирование может быть полезно.
- В данной работе, опираясь на все данные и по экофизиологии и по регистрации динамики численности, строится модель.
- И на ее основе выдвигаются гипотезы о ведущих механизмах, определяющих колебания численности тундровых животных.

В представленной работе решались следующие задачи:

1. По имеющимся экспериментальным данным (и теоретическим представлениям) предложить математические структуры, позволяющие воспроизвести динамику численностей тундровых животных.
2. Указать диапазон параметров при которых (в рамках выбранной структуры) удастся получить динамику близкую к наблюдаемой в природе.
3. Сформулировать гипотезы о ведущих механизмах колебания численности леммингов.

- Моделирование сложных малоизученных эколого-биологических объектов, с далеко неполной информацией об их свойствах приводит к необходимости максимизации использования всех резервов моделирования и использованию *имитационного моделирования (системной динамики)*.
- Но эффективность чисто имитационных технологий сдерживает ряд ограничений (угроза необозримости модели, ограниченность численными расчетами).
- Большая имитационная модель, где каждый блок проверен, выверен со специалистами, не гарантирует правильной работы модели. Такая модель не может быть самодостаточной – это, *инструмент по предварительному исследованию объекта*.
- Привлекательно выглядит сочетание имитационных и аналитических подходов.
- Поиск способов реализации таких сочетаний привел к формированию комплексных исследований (КОИС).

Метод КОИС

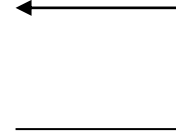
Включает в себя всю последовательность операций:

- Сбор, анализ и переработка исходной (биологической) информации.
- Обоснование и построение детальных имитационных моделей; анализ их свойств.
- Формирование имитационной системы – набора взаимосвязанных моделей разной степени детализации; включающего в себя упрощенные модели, допускающие проведение аналитического (портретного) исследования.
- Формулирования на их основе гипотез о ведущих механизмах исследуемого явления.

Выбор:

- 1) Задачи;
- 2) Объекта;
- 3) «Тестирующего явления»;
- 4) Структуры и методов математического описания.

- Построение имитационной модели
- Вычислительные эксперименты
- Интерпретация результатов



Построение и обоснование упрощенных
(аналитических) моделей

Создание набора взаимосвязанных моделей
различного класса
(имитационной системы)

Генерация гипотез о ведущих механизмах явления

Данный метод был реализован при
*моделировании динамики колебаний
численности животных тундры.*

- Совместный анализ эколого-биологической информации и результатов вычислительных экспериментов с имитационными моделями привел к обоснованию упрощенной модели в виде разностного уравнения.
- Анализ этого уравнения создал возможность выделения трех главных показателей
- В рамках комплексных исследований была осуществлена постановка и решение обратной имитационной задачи: выбор таких (экологически допустимых) постулатов исходной имитационной модели, которые позволяют найти функциональные связи исходной имитационной модели с упрощенной.

Модель

«Растительность-лемминги-песцы»

Тундра относительно простая экосистема – мало видов, трофические связи напряженные, животные живут на грани выживаемости.

Главное достоинство выбранного объекта: наличие ярко выраженных регулярных колебаний численности животных, в частности, песцов и их основного корма – леммингов (тундровых грызунов, широко известных своими миграциями), что является надежным тестирующим эффектом.

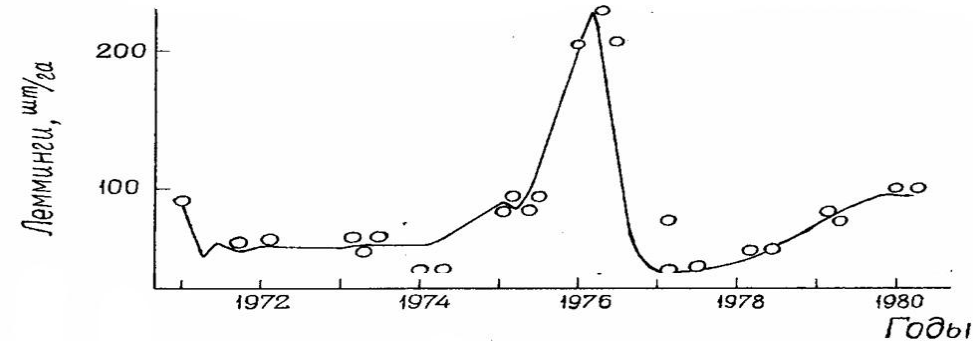
Отмечены регулярные пики численности, в *среднем через три-четыре года*.

На п. Таймыр достаточно регулярно раз в три года.

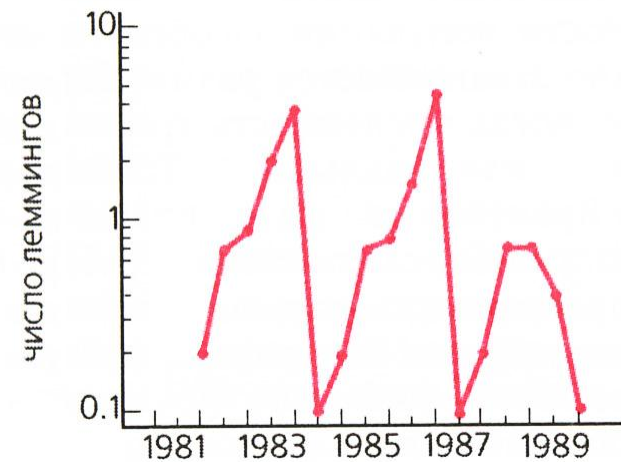
Лемминги и песцы



Экспериментальные данные



Кружки – зарегистрированная численность Леммингов на о. Врангеля



Колебание численности леммингов в Чуанской низменности

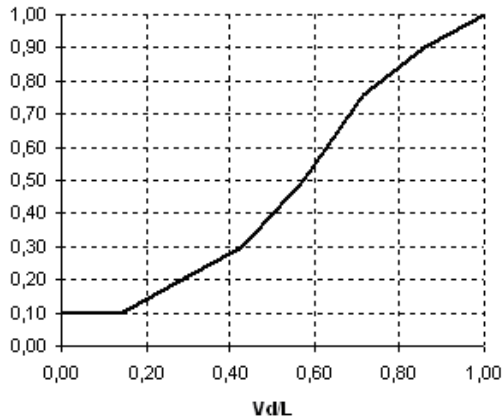
«Экологический конструктор»

- На основании гипотезы Вольтерра - Костицына о возможности представления в модели взаимодействия популяций с помощью систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, в которых одной переменной описывается биомасса (численность) популяции или трофического уровня модель выглядит следующим образом:

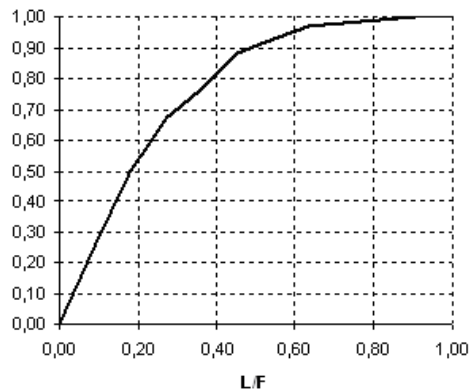
$$dA/dt = R_a - D_a - M_a$$

- Здесь величины R_a , D_a , M_a описывают скорости репродукции, отчуждения и естественного отмирания, а величина A является показателем одного из трофических уровней: W , L , F (растительность, лемминги, песцы).
- Каждая из компонент, в свою очередь, формируется произведением константы и на ряд сомножителей (соответствующих безразмерных функций), каждый из которых уже может обладать достаточно прозрачными свойствами и вид этих зависимостей может быть получен в результате диалога со специалистами соответствующей области.

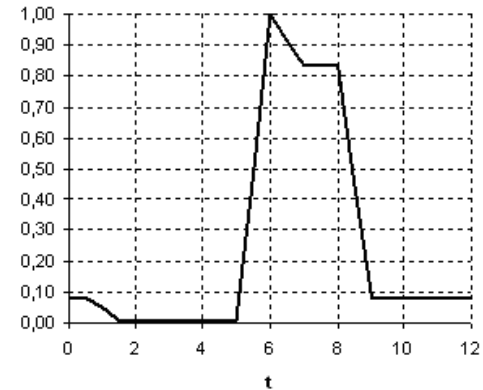
Экспертные функции



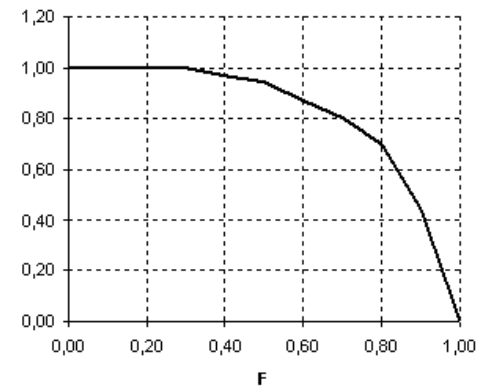
а) функция, формализующая снижение ценности кормов при их дефиците



в) функция насыщения выедания леммингов песцами



б) функция зависимости смертности леммингов от сезона



г) функция самолимитирования песцов

Уравнения модели

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = R_V - M_V - D_V \\ \frac{dL}{dt} = R_L - M_L - D_L \\ \frac{dF}{dt} = R_F - M_F - D_F \end{cases}$$

Растительность

Лемминги

Песцы

$$R_V = a_4 \cdot (1 - V_1 / V_{\max}) \cdot s_1 \cdot V_1$$

$$R_L = D_V \cdot g_2 \left(\frac{V_1 \cdot d}{L} \cdot b_1 \right) \cdot [b_9 \cdot s_2 + b_{10} \cdot s_1]$$

$$R_F = c_1 \cdot g_5(F) \cdot D_L + (c_2 + c_3 \cdot s_1) \cdot F$$

$$M_V = a_3 \cdot (V_1 + V_2) \cdot (1 - s_2)$$

$$M_L = \begin{cases} 0, L \leq \beta; \\ b_5 \cdot g_3(t) \cdot L, V_d / L \geq q; \\ b_4 \cdot [1 - V_d / (L \cdot q)] \cdot g_3(t) \cdot L, V_d / L < q; \\ b_2 \cdot g_3(t) \cdot L, V_d = 0, S_2 = 0; \\ b_2 \cdot L, V_d = 0, S_2 = 1. \end{cases}$$

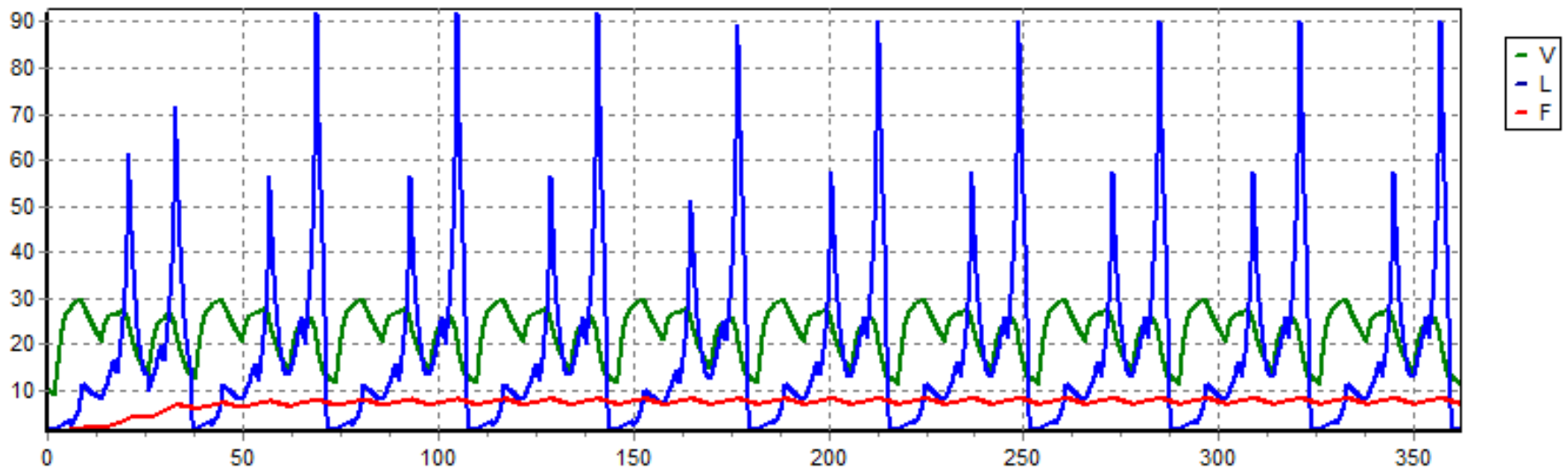
$$M_F = c_4 \cdot F$$

$$D_V = \begin{cases} \{a_1(1 - s_1) + a_2 \cdot s_1\} \cdot L, npu V_1 \cdot d > 0 \\ 0, npu V_1 \cdot d \leq 0 \end{cases}$$

$$D_F = c_5 \cdot F$$

$$D_L = \begin{cases} F \cdot g_4(L / F) \cdot (b_6 + b_7 \cdot s_1), L \geq \beta \\ 0, L < \beta \end{cases}$$

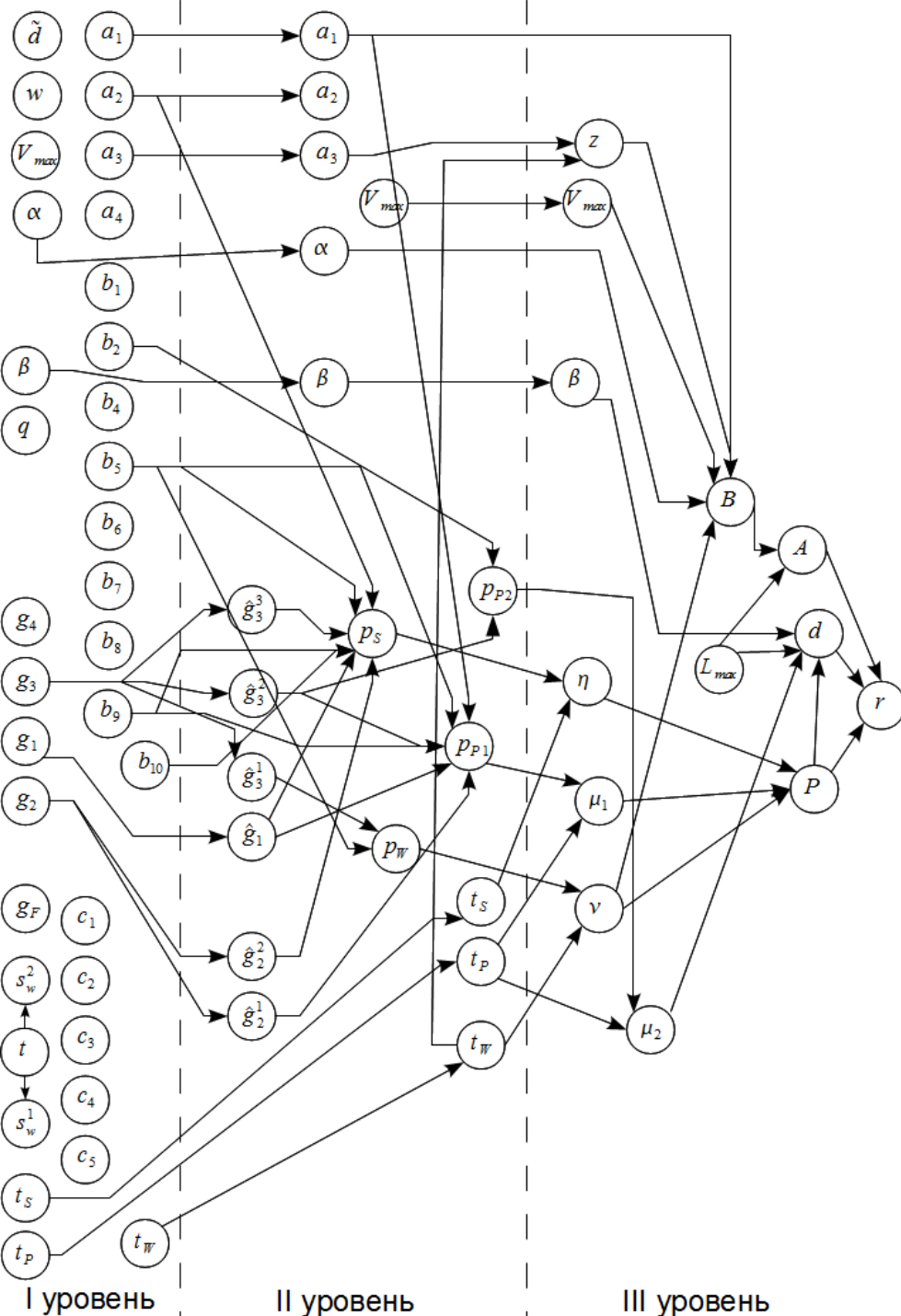
Трехлетние циклы колебания численности леммингов



Результат одного из численных экспериментов

В рамках комплексных исследований удалось свести имитационную модель к разностному уравнению, т.е. решить т.н. **«обратную имитационную задачу»** - выбрать такие постулаты исходной имитационной модели, из которых точно, а не приближенно получается рассматриваемое упрощенное уравнение.

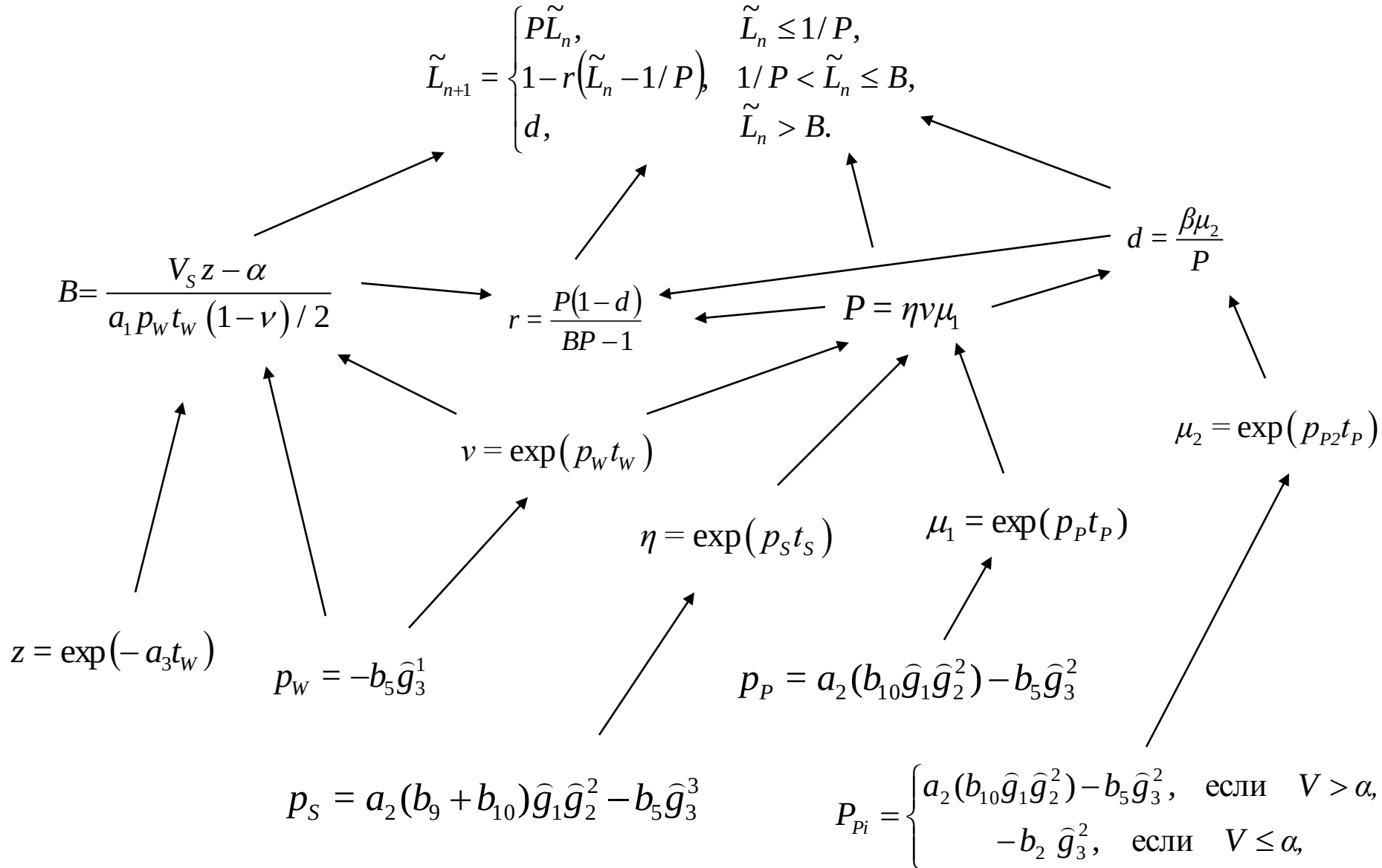
Задача решалась на основе анализа результатов вычислительных экспериментов и основана на том, что в конкретный временной отрезок (сезон) изменение соответствующих переменных происходит в сравнительно узком диапазоне, что позволяет осуществить линеаризацию соответствующих функций.



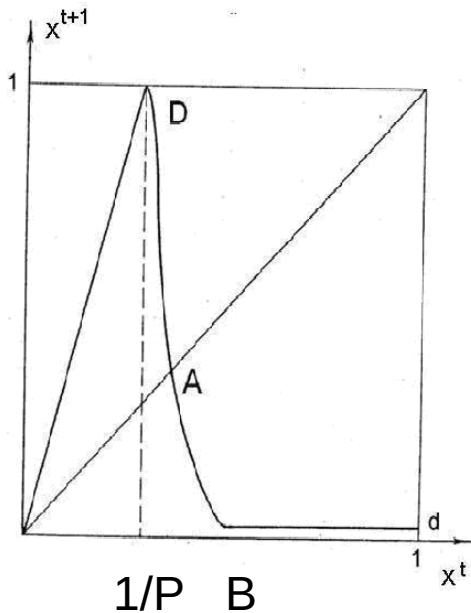
Набор моделей представляет собой «имитационную систему». В рамках этой системы системы удастся провести согласование моделей разного класса – имитационной и соответствующего разностного уравнения.

- 1 уровень – детальная имитационная модель (34 параметра, 12 уравнений)
- 2 уровень – упрощенная аналитическая модель (19 параметров, 8 уравнений)
- 3 уровень – разностное уравнение (3 параметра, 1 уравнение)

Переходные формулы в обратной имитационной задаче



Разностное уравнение



$$\tilde{L}_{n+1} = \begin{cases} P\tilde{L}_n, & \tilde{L}_n \leq 1/P, \\ 1 - r(\tilde{L}_n - 1/P), & 1/P < \tilde{L}_n \leq B, \\ d, & \tilde{L}_n > B, \end{cases}$$

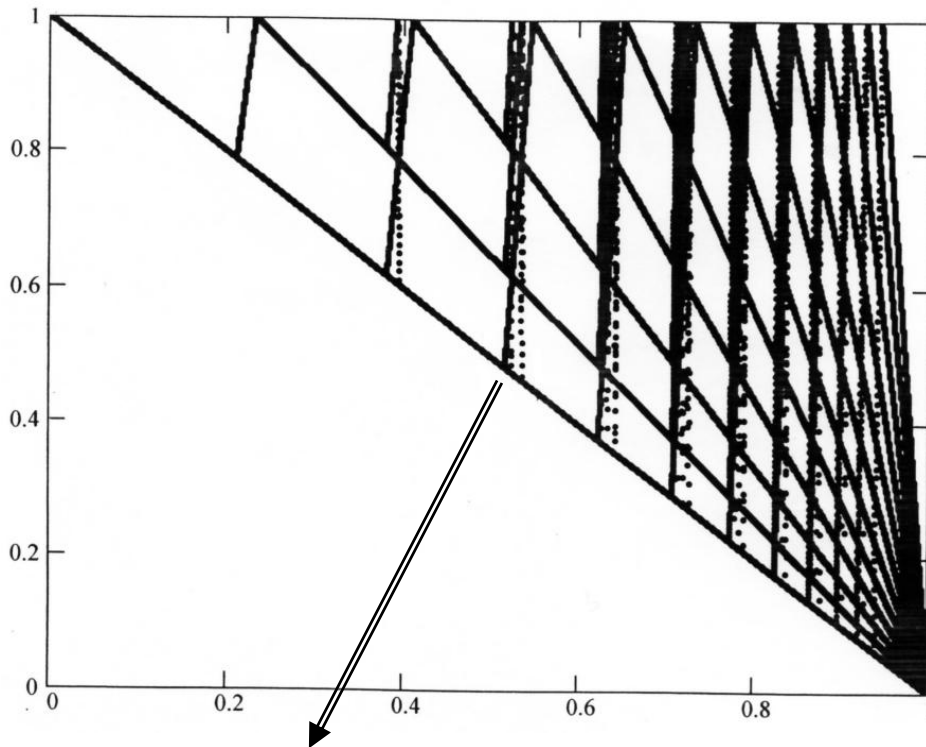
- Здесь D – точка достижения максимального значения численности, A – равновесная численность, B – условие наступления бескормицы, d – численность леммингов в оптимальном биотопе (понятие «оптимальный биотоп» и подразумевает область пространства обитания с «оптимальными условиями проживания», в оптимальном биотопе при любых условиях выживает определенная численность зверьков).

Сформулированные гипотезы

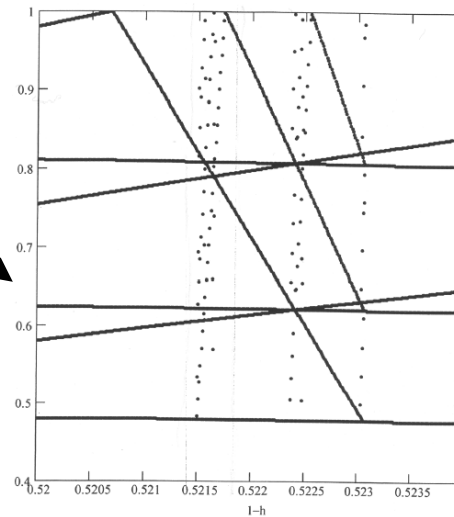
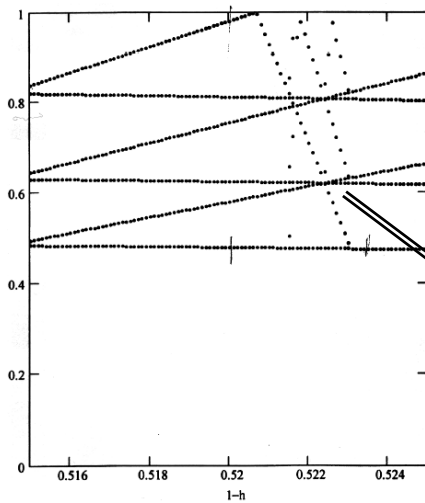
Использование разностных уравнений позволило сформулировать гипотезы формирования колебаний численности леммингов (и вследствие этого и песцов). Колебания численности определяются:

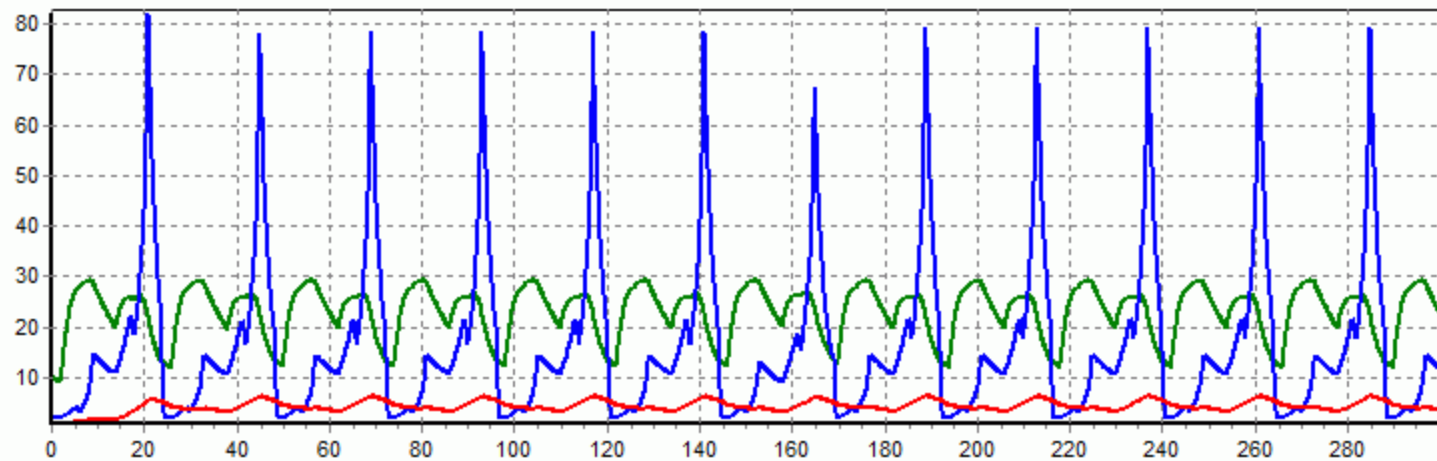
- 1) скоростью прироста биомассы в благоприятный год;**
- 2) максимальной численностью;**
- 3) выживаемостью в наиболее неблагоприятных условиях .**

Первый показатель характеризует баланс между процессами рождаемости и смертности в отсутствии "давления среды"; второй характеризует экосистему в целом и отражает коэволюцию леммингов и кормовой базы; третий характеризует адаптационные свойства леммингов в экстремальных условиях и во многом определяется локальными характеристиками, в частности рельефом местности в местах перезимовки.



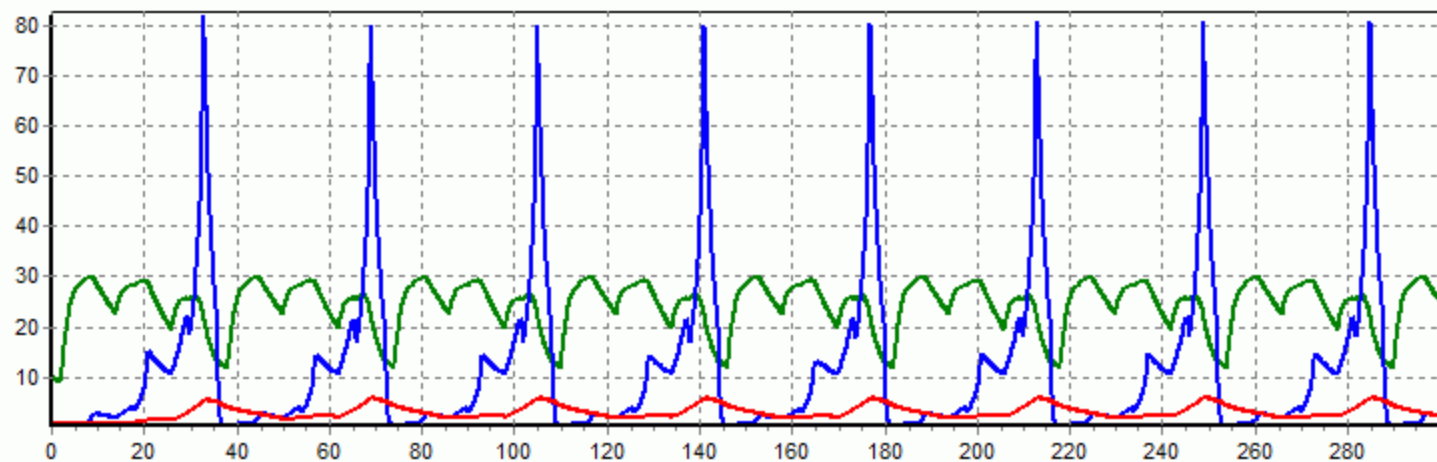
Зависимость
траекторий расчётной
модели от параметра d .
Результаты
вычислительных
экспериментов.





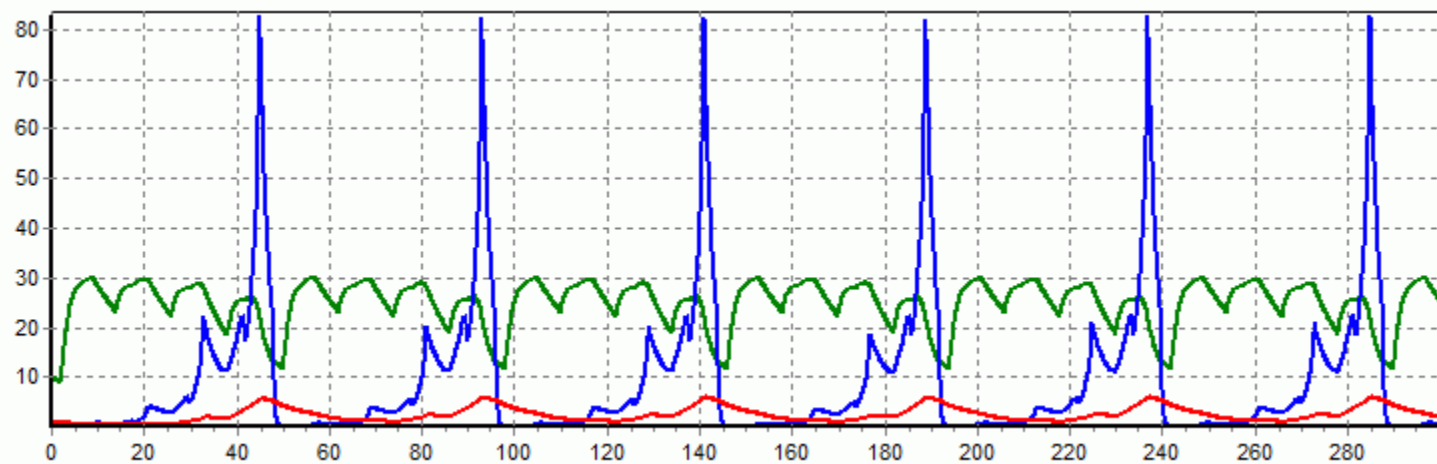
$\beta=2,02$

Время (мес)



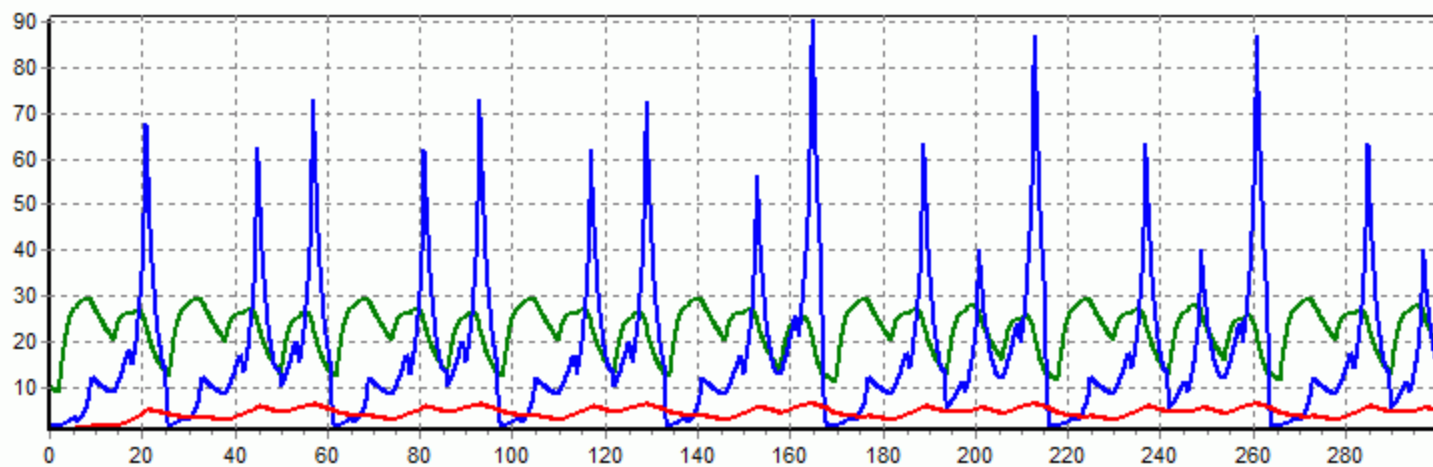
$\beta=0,4$

Время (мес)



$\beta=0,11$

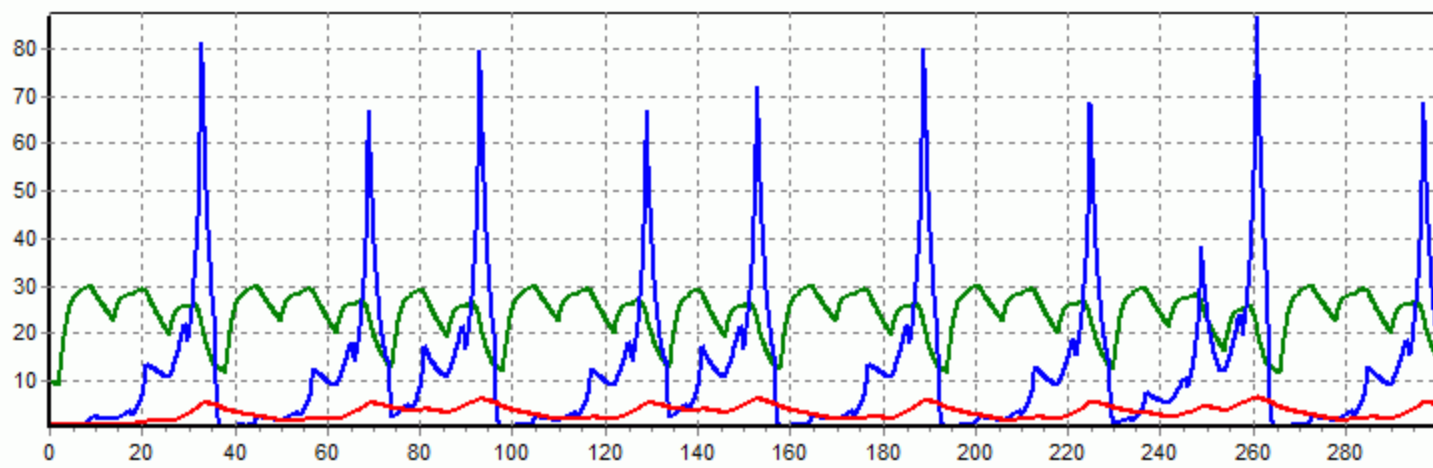
Время (мес)



V
L
F

$\beta=1,7$

Время (мес)

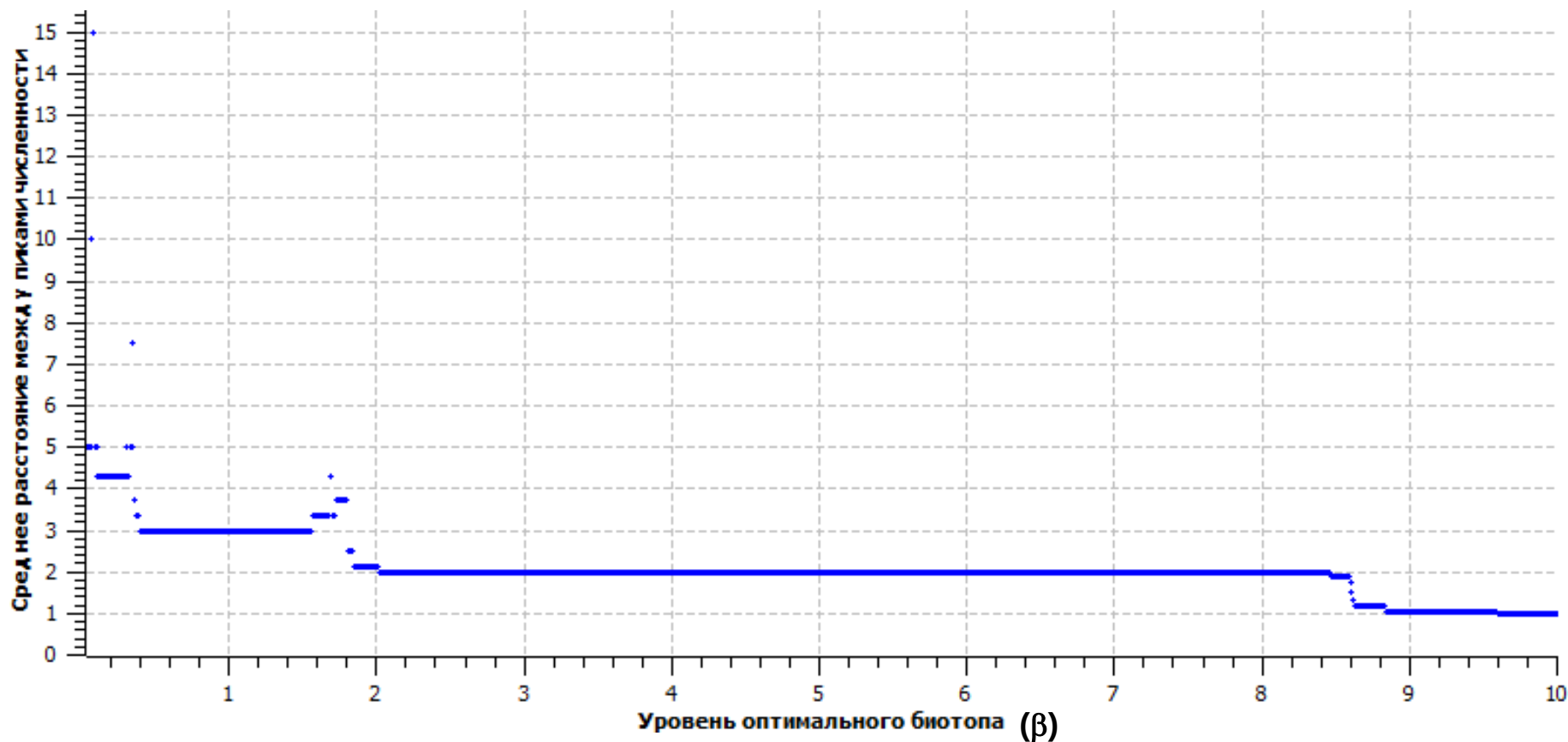


V
L
F

$\beta=0,35$

Время (мес)

Зависимость среднего расстояния между пиками численности от уровня оптимального биотопа



Индивидуально-ориентированная модель

- Развитие имитационных технологий, реализация на их основе процедуры обоснования уравнений, позволили, в процессе моделирования колебаний численности тундровых популяций и сообществ, благодаря специфике экологического объекта, построить набор взаимно согласованных моделей разной степени сложности.
- Полученное замкнутое, целостное описание позволило в результате моделирования выделить ведущие параметры, сформулировать гипотезы о степени их влияния на динамику колебаний численности рассматриваемых популяций.
- Это позволило перейти на более детальный уровень описания с помощью индивидуально-ориентированных моделей.

Характеристики пространства

- Данная модель относится к классу пространственно-распределенных
- Все моделируемые объекты ассоциированы с определенным положением в пространстве
- Пространство – дискретное, двумерное, описывается в виде дискретной сетки, состоящей из ячеек

Параметры

- Возраст особи
- Координаты норы
- Координаты особи
- Потенциал жизнестойкости
- Уровень сытости
- Генотип особи
- Уровень растительности

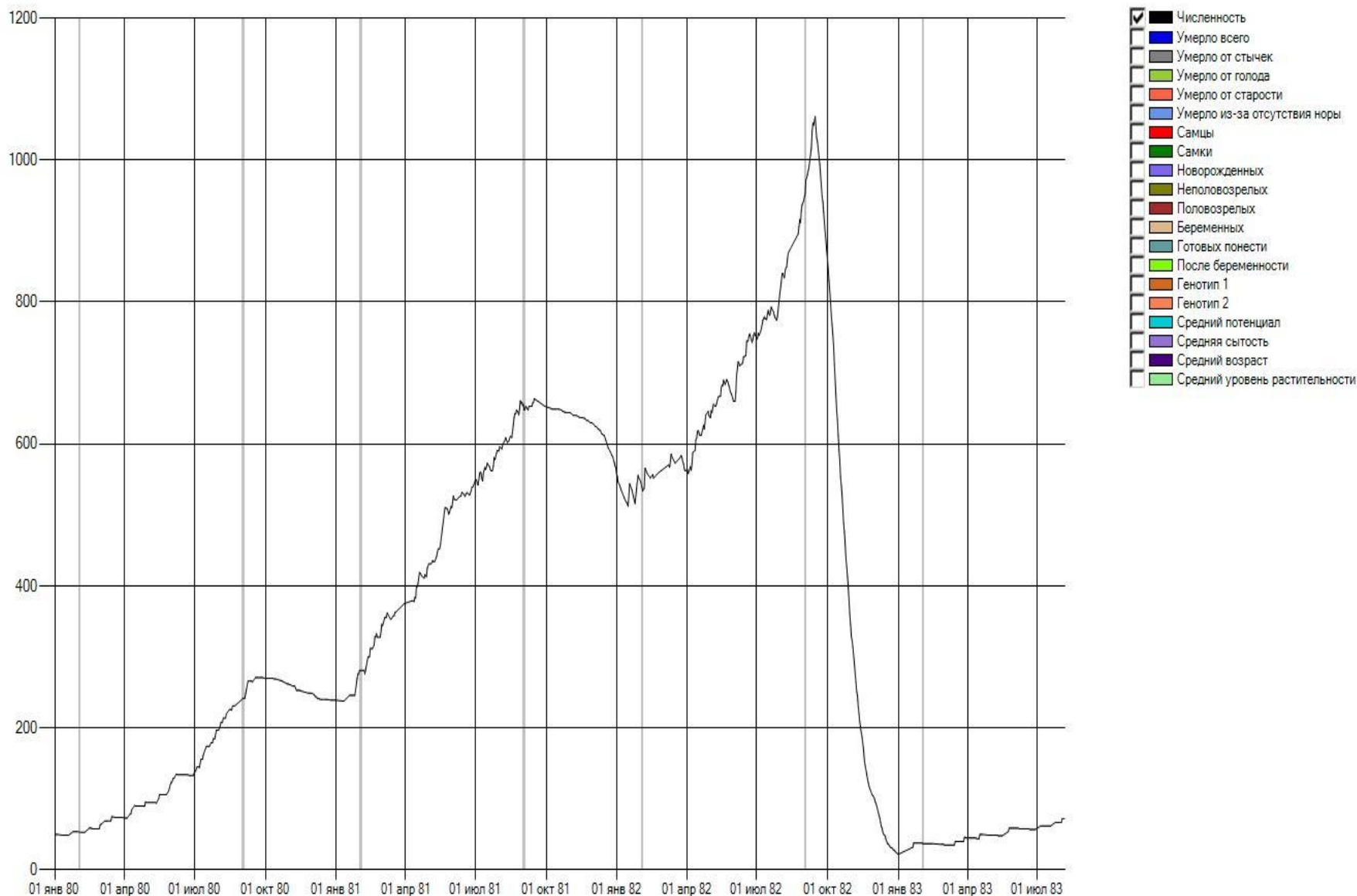
Процессы

- Движение
- Питание
- Рост
- Стойки с другими особями
- Изменение потенциала
- Беременность
- Рождение потомства
- Смерть

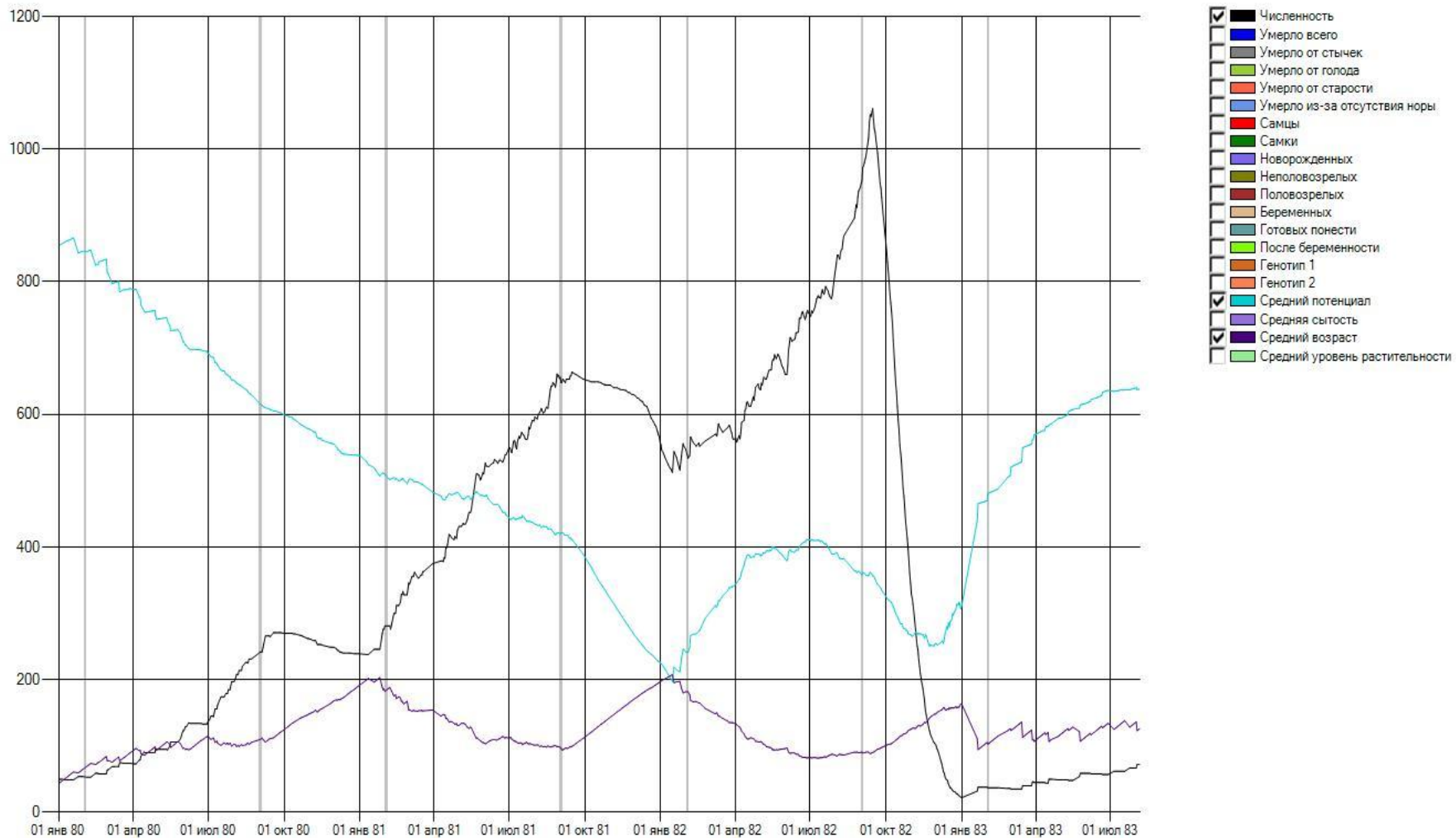
Алгоритм работы модели

- Начальное распределение(установка размера площади, начальное количество леммингов и т.д.)
- Цикл состоит из:
 - 1) Передвижения особи
 - 2) Действия(стычка, размножение, питание)
 - 3) Пересчета параметров(возраст и т. д.)Далее выполняется следующая итерация.

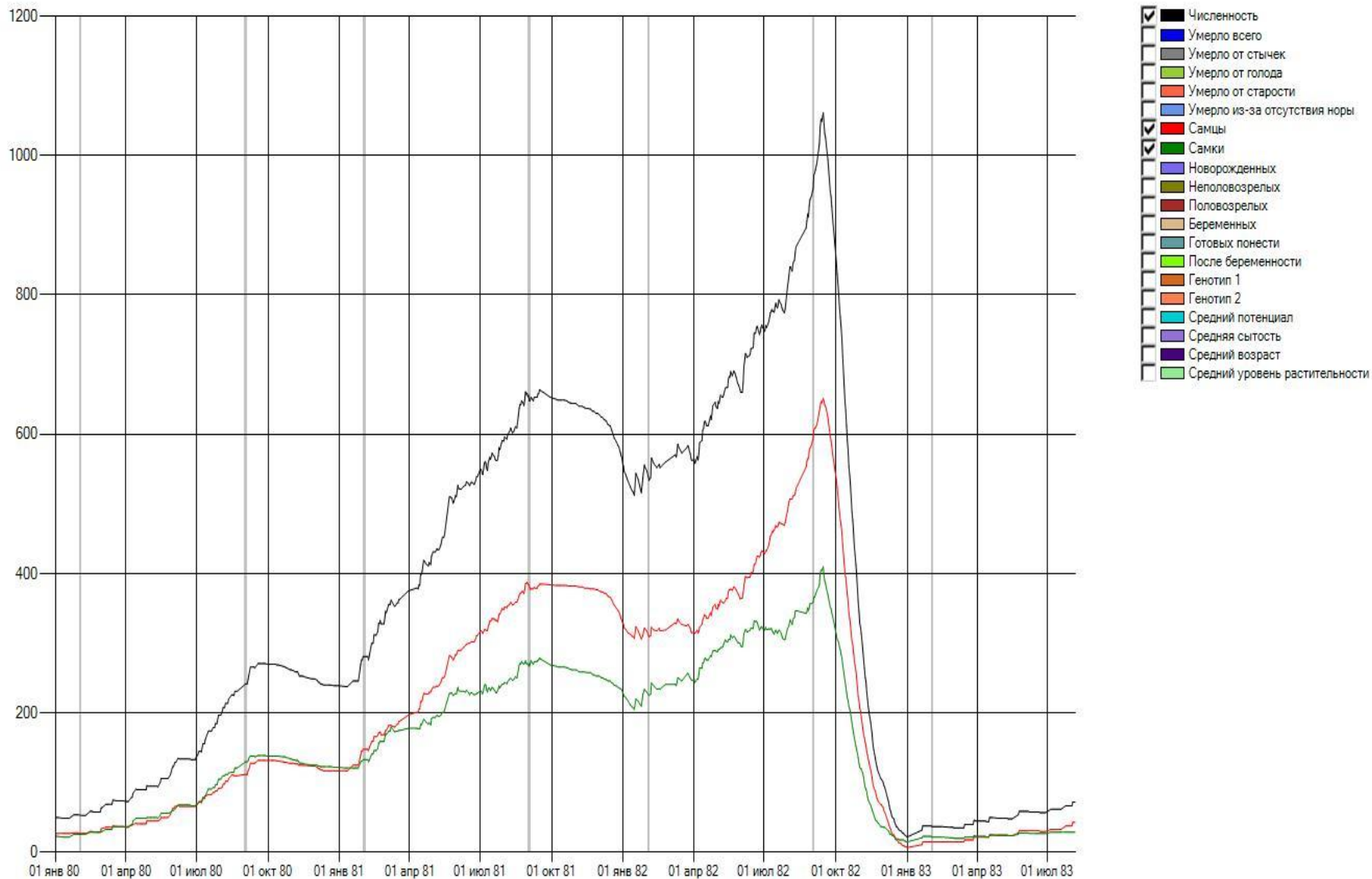
Динамика численности (3 года)



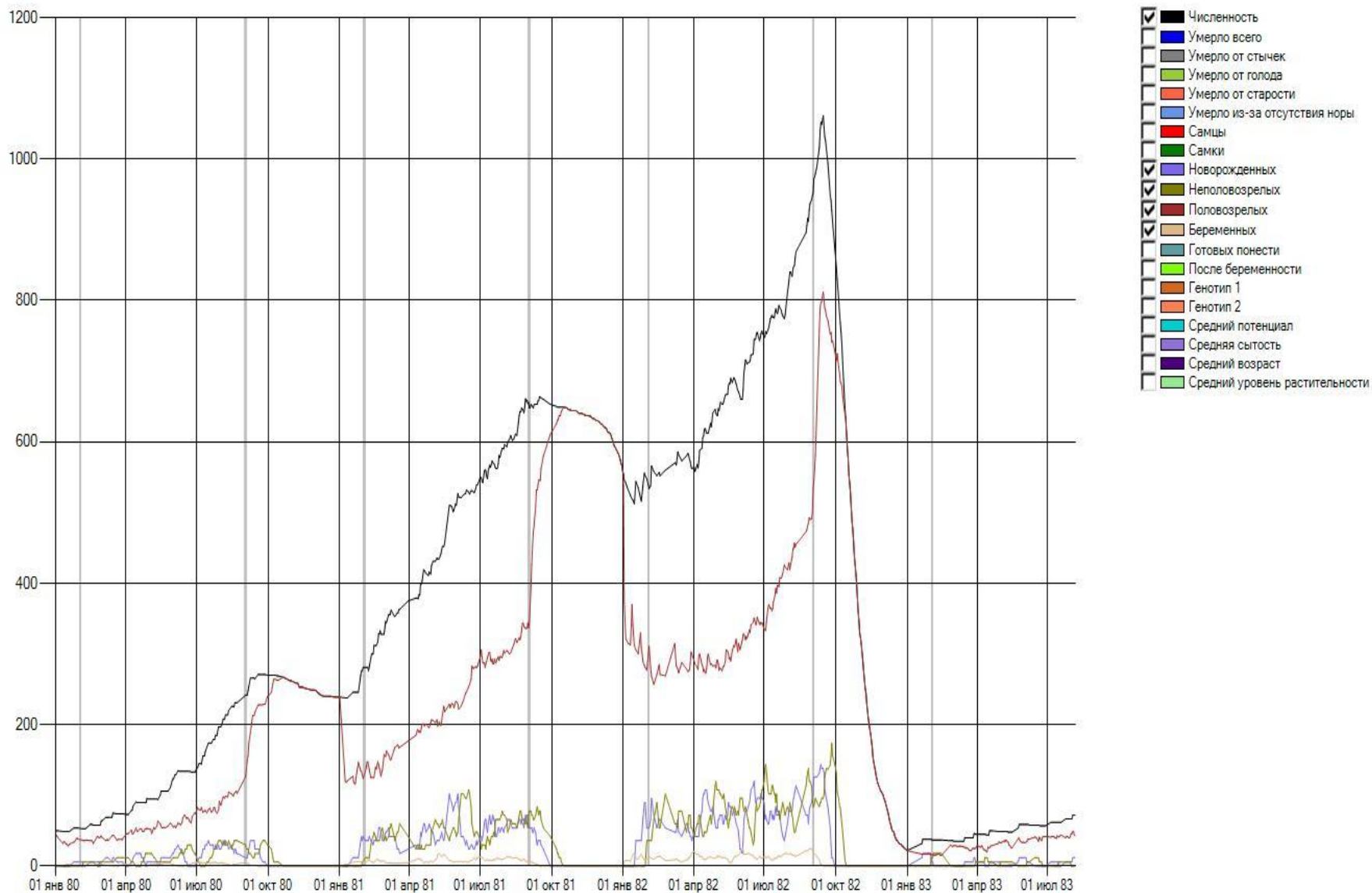
Средний потенциал и возраст



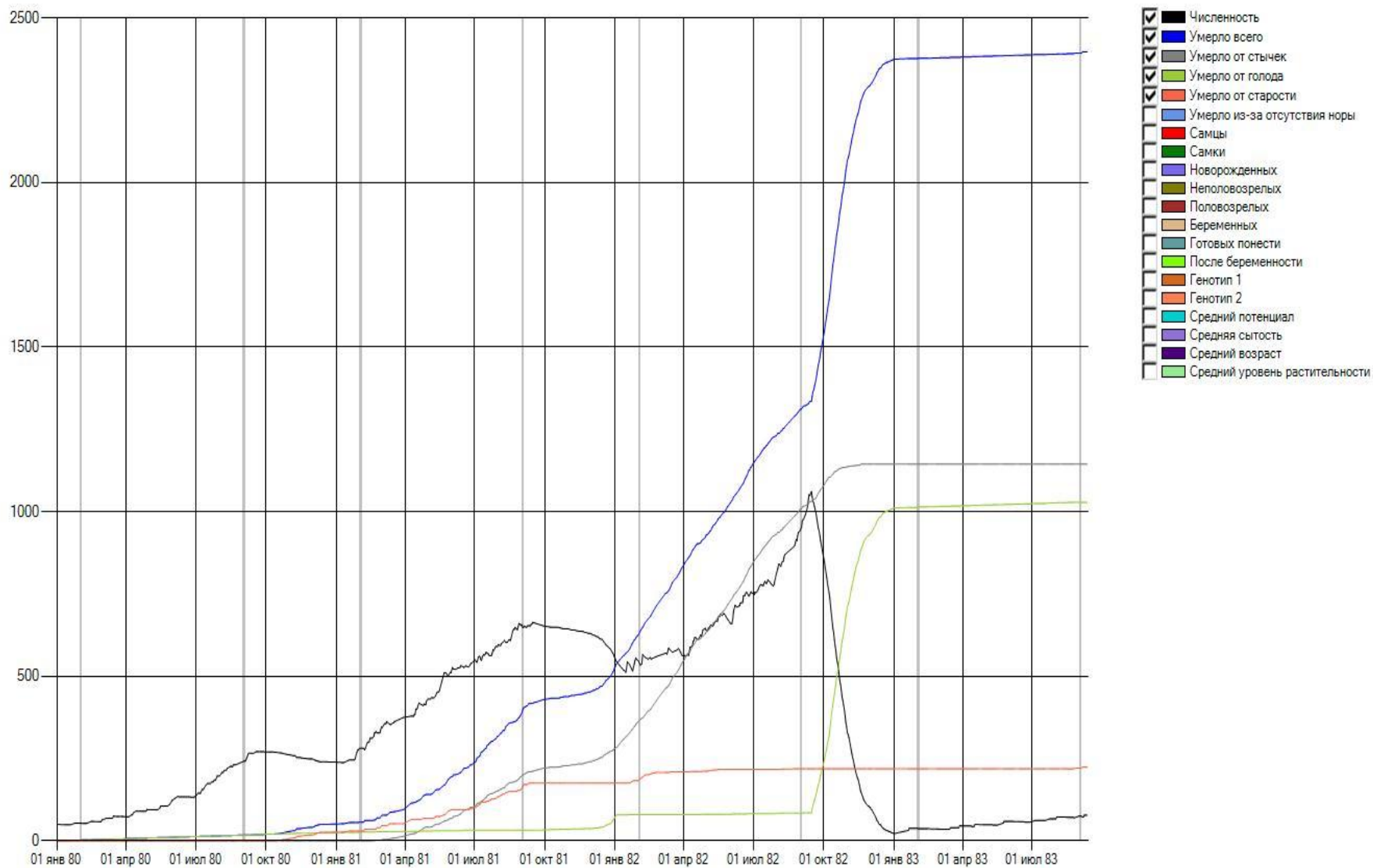
Самцы, самки



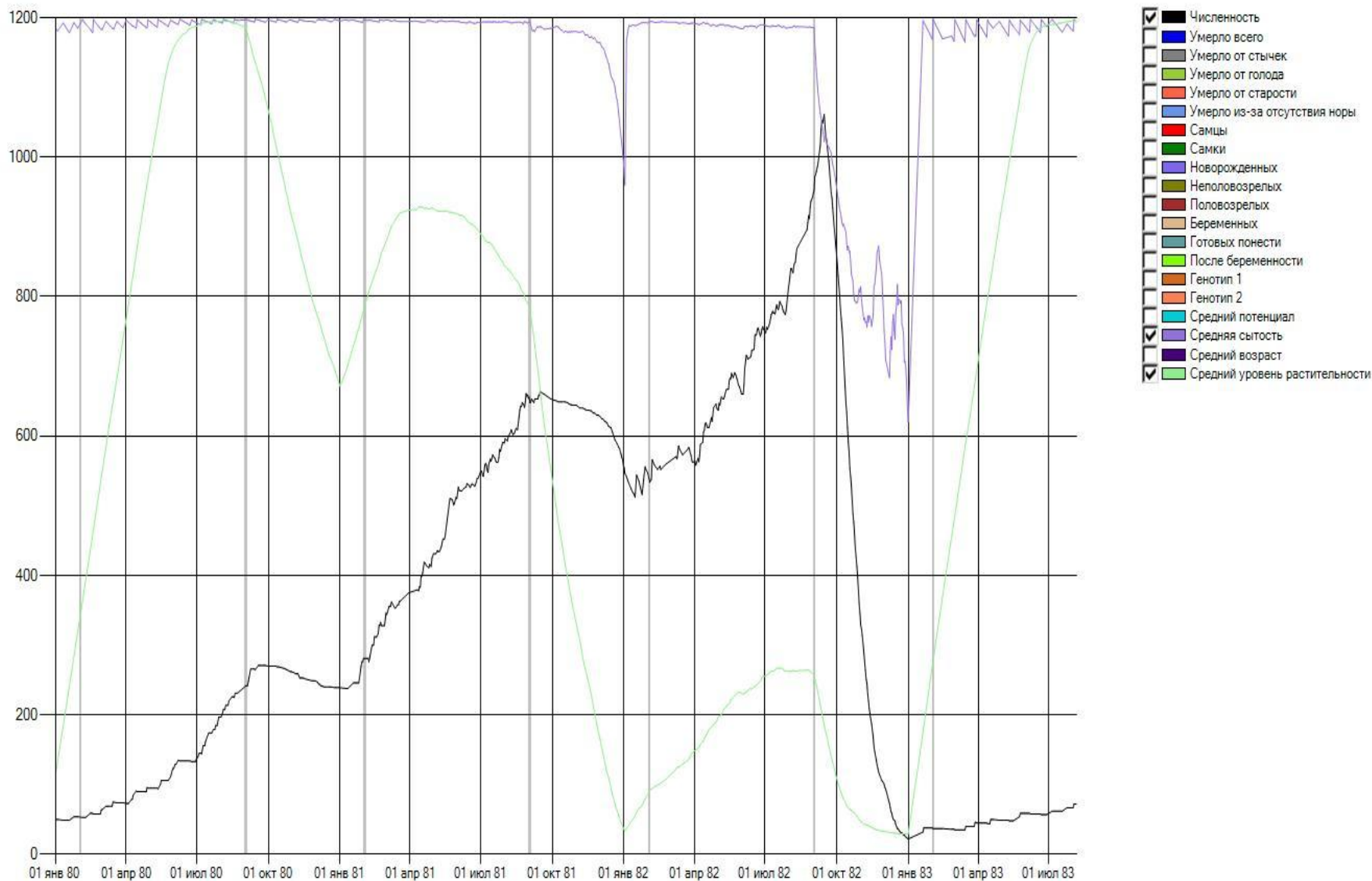
Стадии леммингов



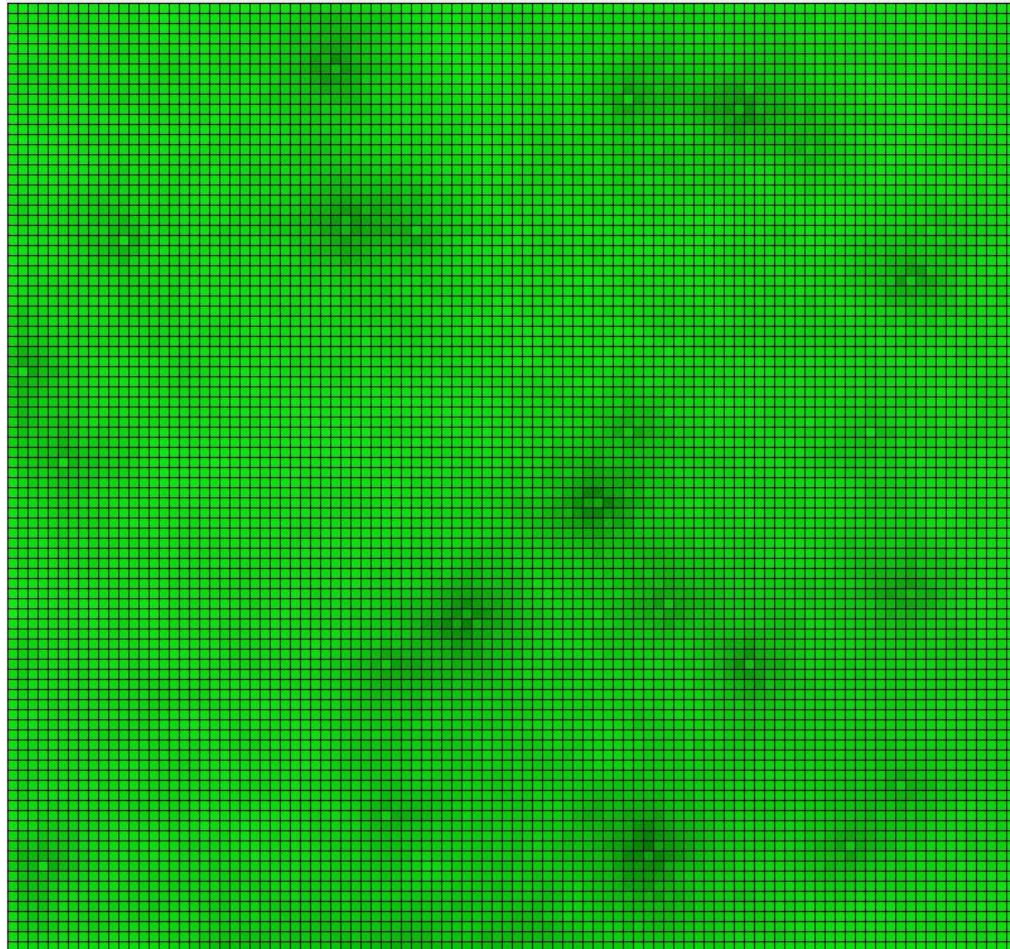
Смертность



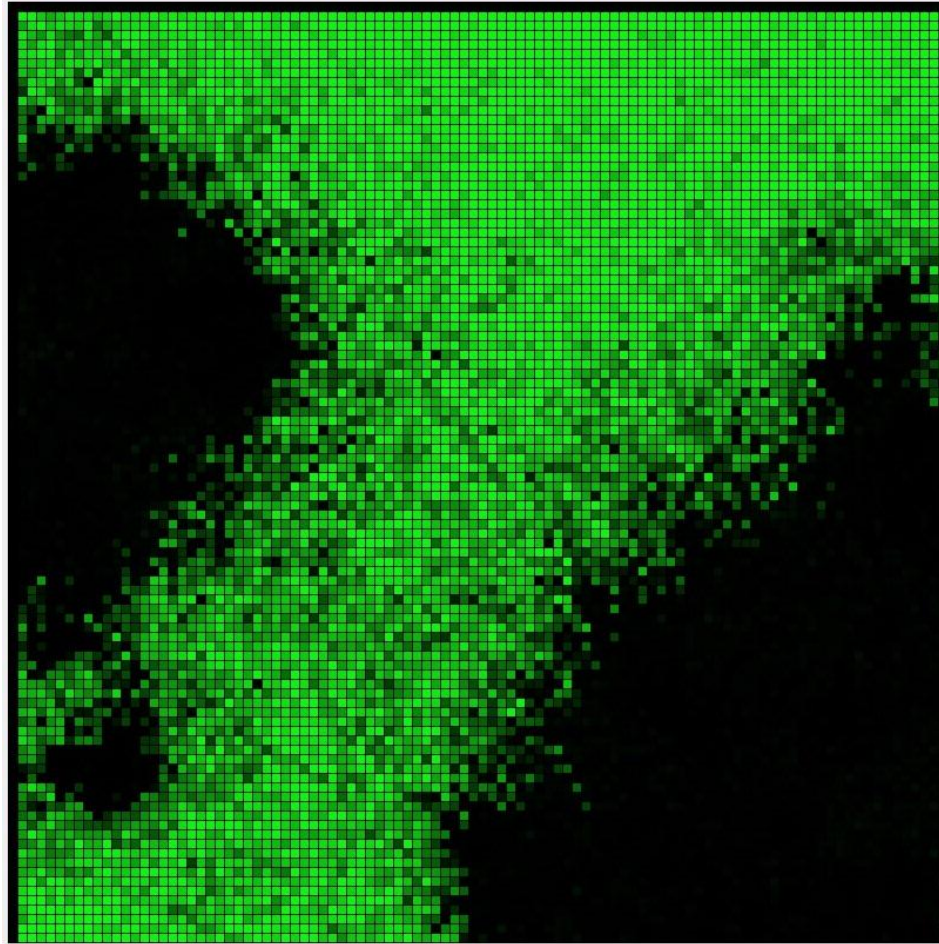
Уровень растительности



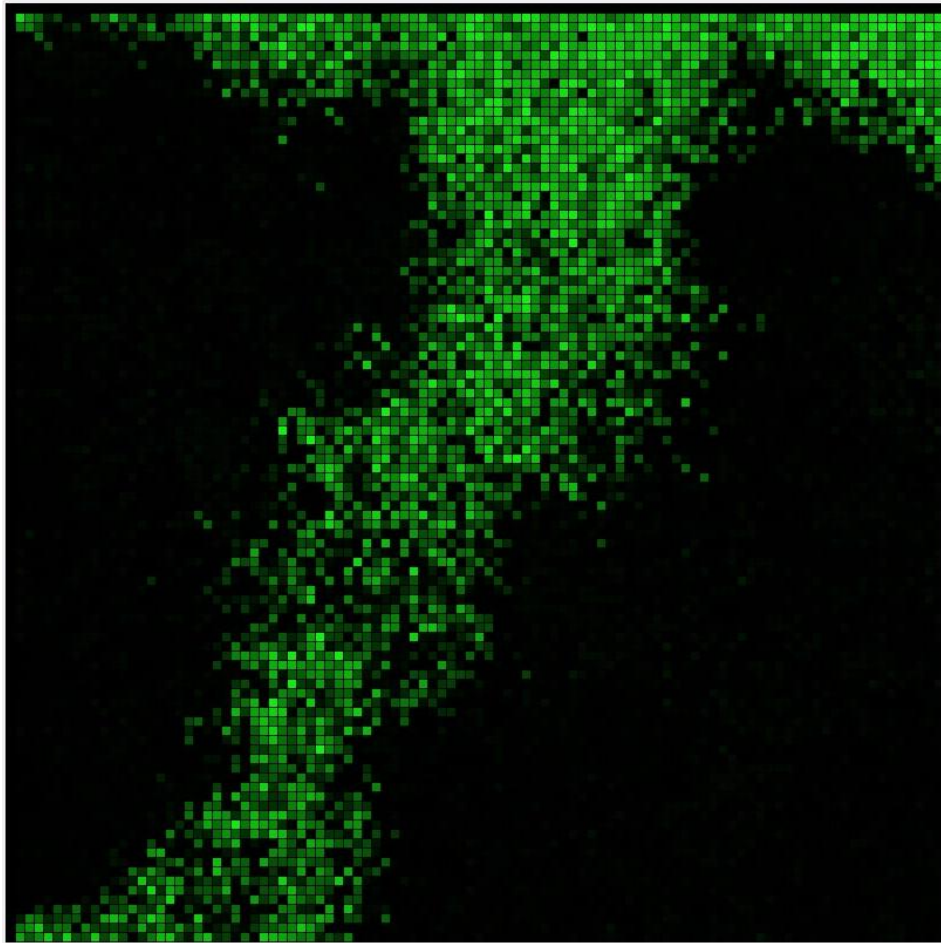
Распределение растительности (начальное)



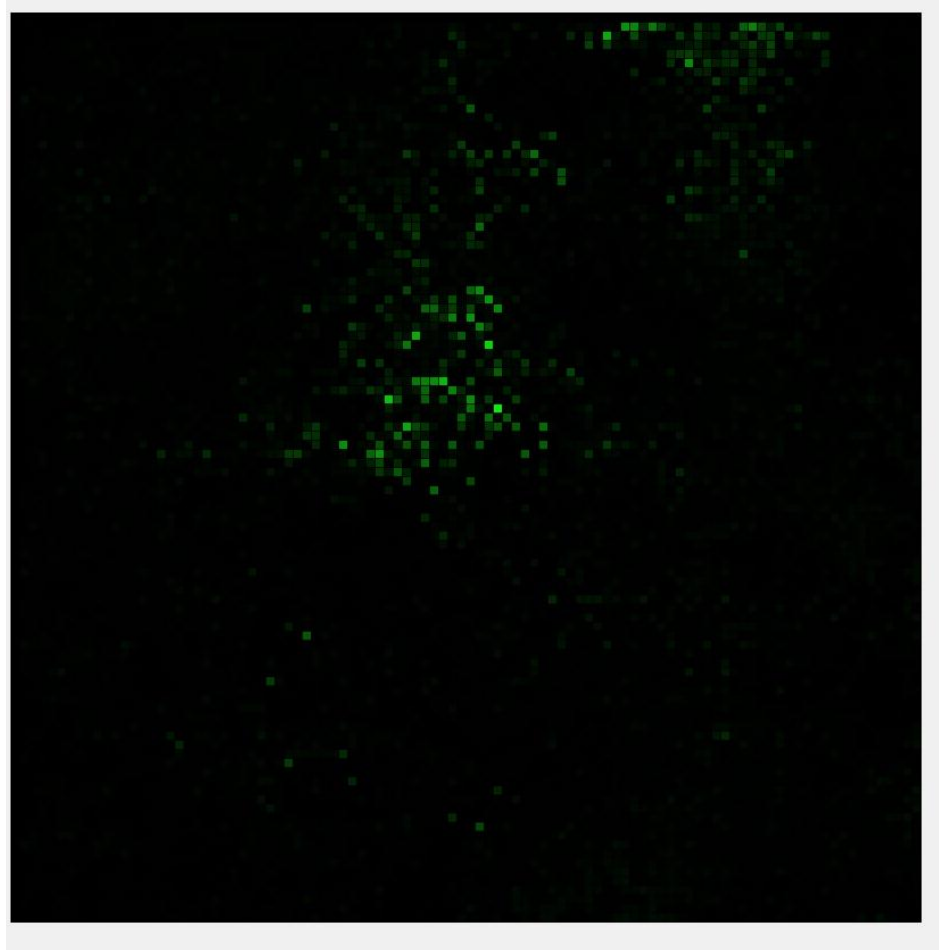
Распределение растительности (1й год)



Распределение растительности (2й год)



Распределение растительности (3й год)



Взаимосвязь моделей

После решения «*обратной имитационной задачи*» можно проводить настройку исходной (имитационной) модели РЛП следующим образом: сначала по функции последования определяем, какими должны быть ее параметры для получения необходимой динамики. Затем, используя формулы перехода, выясняем, какими параметрами исходной модели можно оперировать для изменения нужного параметра или параметров функции последования. Поскольку почти все они зависят от нескольких исходных параметров, реализуется возможность выбора различных вариантов и внесения наиболее биологически осмысленных изменений.

- Наличие в имитационной системе упрощенных моделей, допускающих параметрические исследования, в корне изменило возможности, потенциал моделирования.
- Упрощенные модели это и инструмент настройки исходной имитационной модели на соответствующие динамические режимы и главное - способ генерирования гипотез о ведущих механизмах изучаемого явления.

Модель северного оленя

Основные предположения

- Модельная площадь – 100 кв.км.
- Максимальная численность популяции на данной площади – 120 особей.
- Рост популяции оленей ведет к снижению биомассы лишайников до 3 ц./га.
- Затем рост сменяется падением.
- Максимальная биомасса лишайников 10 ц./га.
- Биомасса лишайников ниже 3 ц./га. является критической.
- При этой биомассе лишайников, плодовитость особей падает до нуля и существенно увеличивается смертность.
- Выедание запасов лишайников не может быть полным, и их восстановление начинается раньше, чем популяция оленей достигает минимума.
- Период роста популяции 25-30 лет.
- Падение численности популяции 10 лет.

Критические уровни растительности

Было привлечено следующее предположение:

- Кормовые запасы могут использоваться животными лишь до определенного для них критического уровня, соответствующего тому минимальному запасу, при котором животные ещё способны собрать необходимое количество пищи.
- Дальнейшее снижение кормовых запасов губительно для данной популяции и поэтому обычно не возможно.*

*Абатуров Б.Д. О механизмах естественной регуляции взаимоотношений растительноядных млекопитающих и растительности // Зоологический журнал – 1975, том 54, вып. 5.

Уравнения модели

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = R_V - M_V - D_V \\ \frac{dR}{dt} = R_R - M_R \end{cases}$$

Лишайники

Прирост растительности

$$R_V = a_1 \cdot \left(1 - \frac{V}{V_{\max}}\right) \cdot V$$

Естественное отмирание растительности

$$M_V = a_2 \cdot V$$

Отчуждение растительности
если корма достаточно

$$D_V = b_1 \cdot R$$

Отчуждение растительности
если корма не достаточно

$$D_V = V \cdot f_{dv}(V)$$

Олени

Прирост популяции оленей,
если корма достаточно ($V \geq \alpha$)

$$R_R = D_V \cdot k_{pbr}$$

Прирост популяции оленей,
если корма не достаточно ($V < \alpha$)

$$R_R = 0$$

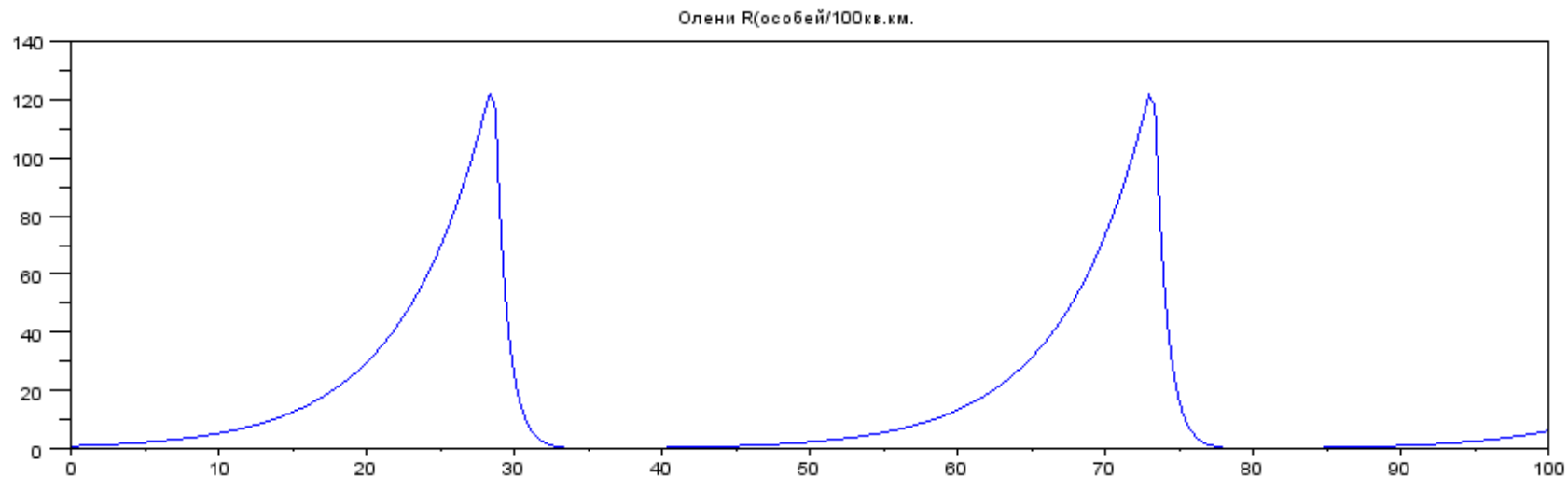
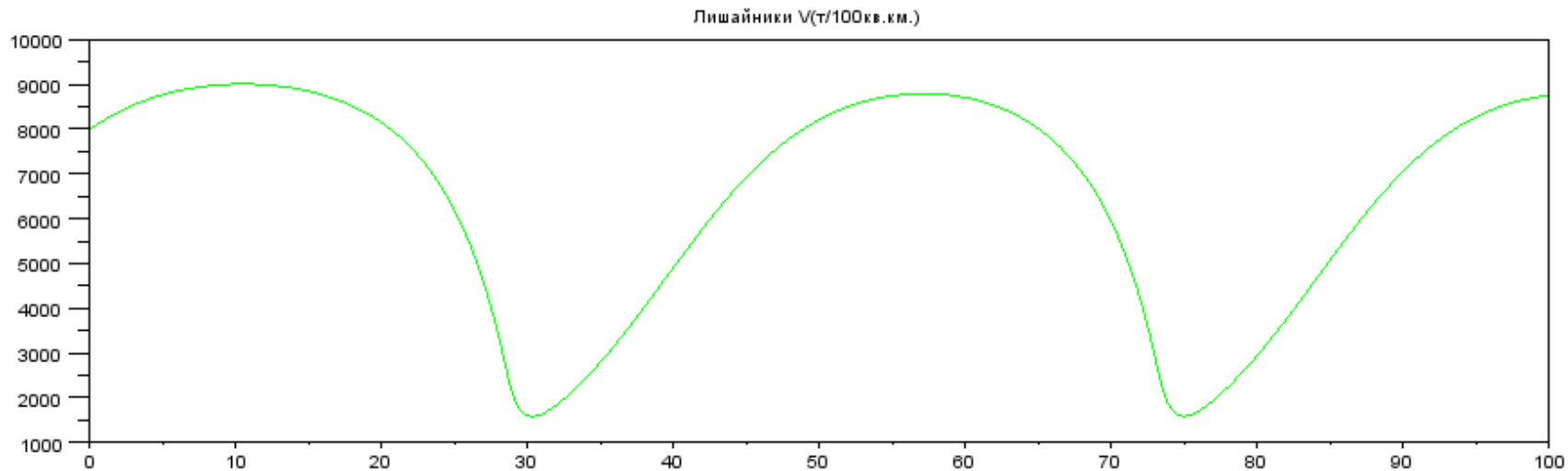
Отмирание оленей,
если корма достаточно ($V \geq \alpha * 0.8$)

$$M_R = R \cdot b_2$$

Отмирание оленей,
если корма не достаточно ($V < \alpha * 0.8$)

$$M_R = R \cdot b_3$$

Результат вычислительного эксперимента



Один из вариантов развития этого
направления -
поиск аналитического решения
неавтономной системы
дифференциальных уравнений

Аналитическое решение зимой

Прирост, отчуждение и естественное отмирание параметризуются следующим образом: $R_L=0$, $R_V=0$, $D_V=C_2L$, $D_L=0$, $M_V=C_1V$, $M_L=C_3L$, где C_1 , C_2 , C_3 –некоторые константы. Естественная смертность леммингов M_L зависит от сезона и наличия кормов. Но с математической точки зрения функция M_L имеет всегда один и тот же вид (разница в значении константы C_3). При этом здесь и далее предполагается, что для упрощения решения системы функция смертности леммингов в зависимости от сезона, входящая в параметризацию M_L , постоянна в каждом месяце. Система (1) приобретает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = C_1V + C_2L, \\ \frac{dL}{dt} = C_3L. \end{cases}$$

Решения данной системы следующие:

$L(t) = C_4 e^{C_3 t}$, $V(t) = ae^{C_1 t} + be^{C_3 t}$. Здесь a , C_4 , b – некоторые константы.

Аналитическое решение весной

Прирост, отчуждение и естественное отмирание параметризуются следующим образом: $R_L=HA_1A_2L$, $R_V=0$, $D_V= CL$, $D_L=0$, $M_V=0$, $M_L=C_5L$, где H , A_1 , A_2 , C_5 – некоторые константы. При этом здесь и далее предполагается, что функция оптимальной плотности леммингов и функция, формализующая снижение ценности кормов при их дефиците, заменены на A_1 и A_2 для упрощения решения системы. Система (1) приобретает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = CL, \\ \frac{dL}{dt} = B_2L. \end{cases}$$

Здесь B_2 – константа, зависящая от H , A_1 , A_2 , C_5 .

Решения данной системы следующие: $L(t) = A e^{B_2 t}$, $V(t) = F_0 e^{B_2 t} + C_0$. Здесь A , F_0 , C_0 – некоторые константы.

2.3 Аналитическое решение летом

Прирост, отчуждение и естественное отмирание параметризуются следующим образом: $R_L = H^0 A^1 A^2 L$,
 $R_V = C_1^* \left(1 - \frac{V}{C_2^*} \right) \cdot V$, $D_V = C_4^* L$, $D_L = 0$, $M_V = 0$, $M_L = C_6 L$, где H^0 , A^1 , A^2 , C_1^* , C_2^* , C_4^* , C_6 – некоторые константы.

Система (1) приобретает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = C_1^* V - KV^2 + C_4^* L, \\ \frac{dL}{dt} = B_2^* L. \end{cases}$$

Здесь $K = \frac{C_1^*}{C_2^*}$, B_2^* – константа, зависящая от H^0, A^1, A^2, C_6 . Очевидно, что функция $L(t) = M_1 e^{M_2 t}$, где

M_1 и M_2 – некоторые константы. Далее решение системы сводится к решению уравнения Риккати:

$$\frac{dV}{dt} = C_1^* V - KV^2 + M_1 e^{M_2 t}. \quad (2)$$

$$V(M_2 t) = e^{KM_2 t/2} \left[n_1 J_K \left(2\sqrt{M_1} e^{M_2 t/2} \right) + n_2 K_K \left(2\sqrt{M_1} e^{M_2 t/2} \right) \right]$$

$n_1 - const, n_2 - const, J_K, K_K - \text{функции Бесселя}$

Литература

- *Абатуров Б.Д.* О механизмах естественной регуляции взаимоотношений растительноядных млекопитающих и растительности // Зоологический журнал – 1975, том 54, вып. 5.
- *Вольтерра В.* Математическая теория борьбы за существование. Пер. с фр. под ред. Ю.М. Свирижева. М.: Наука, 1976. 286 с.
- *Костицын В.А.* Эволюция атмосферы, биосферы и климата// М.: Наука , 1984, 96 с.
- Компьютерные методы анализа математических моделей экологических систем. М.: ВЦ РАН,. 2006 74 с. *Глушков В.Н., Недоступов Э.В., Саранча Д.А, Юферова И.В.*
- *Лопатин В.Н. Абатуров Б.Д.* Математическое моделирование трофически обусловленной цикличности популяции северного оленя (RANGIFER TARANDUS) //Зоологический журнал, 2000, том 79, №4, с. 452-460
- *Саранча Д.А.* Биомоделирование. М.: ВЦ РАН, 1995. 102 с.
- *Саранча Д..А., Сорокин П.А., Фролова А.А.* Математическое моделирование динамики численности популяций животных. М.: ВЦ РАН,. 2005. 27 с .
- *Форрестер Дж.* Мировая динамика. М.: Мир, 1978. 234 с.
- *Чернявский, Ф. Б.* Лемминговые циклы // Природа. – 2002, № 10.

Спасибо за внимание !