

ПРИМЕНЕНИЕ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЗНАНИЙ

¹Даянова Д.Д.

¹ООО «Мониторинг Вентиль и Фитинг», Москва, e-mail: dayanova@mvifl.ru

АННОТАЦИЯ

Объектом исследования данной статьи является поиск информационных технологий, которые можно применять для хранения и анализа биологических данных. В исследовании даётся обзор современных методов моделирования, которые позволяют изучать какой-либо процесс или явление. Рассматриваются такие аспекты моделирования, когда проведение экспериментов над реальной системой невозможно или нецелесообразно, и на основе итоговых результатов получать новые биологические знания. Также в данной статье обосновывается идея, что моделирование является одним из успешных способов решения практических задач.

Автор изучает подходы, используемые при моделировании систем, даёт их сравнение, выявляет их сильные и слабые стороны. В ходе исследования раскрываются специфические черты живых систем, которые необходимо учитывать при построении моделей.

Автор приходит к выводу, что использование современных методов и средств моделирования, используемых для сбора, хранения и переработки информации, которая получается в ходе биологических исследований, позволяет выявлять новые количественные и качественные закономерности изучаемых процессов и явлений. По результатам проведенного исследования обосновывается положение о том, что современные методы моделирования могут применяться для изучения разнообразных биологических феноменов.

Ключевые слова: модель, методы моделирования, классический подход, системный подход, биологические данные.

APPLICATION OF MODERN MODELING METHODS FOR OBTAINING NEW BIOLOGICAL KNOWLEDGE

¹Dayanova D.D.

¹Monitoring Ventil and Fitting LLC, Moscow, e-mail: dayanova@mvifl.ru

АННОТАЦИЯ НА АНГЛИЙСКОМ ЯЗЫКЕ

The object of the study of this article is the search for information technologies that can be used to store and analyze biological data. The study provides an overview of modern modeling methods that allow you to study a process or phenomenon. Such aspects of modeling are considered when it is impossible or impractical to conduct experiments on a real system, and based on the final results to obtain new biological knowledge. This article also substantiates the idea that modeling is one of the successful ways to solve practical problems.

The author studies the approaches used in modeling systems, gives their comparison, identifies their strengths and weaknesses. The study reveals specific features of living systems that must be taken into account when building models.

The author concludes that the use of modern modeling methods and tools used to collect, store and process information that is obtained in the course of biological research makes it possible to identify new quantitative and qualitative patterns of the processes and phenomena studied. Based on the results of the study, the provision is substantiated that modern modeling methods can be used to study various biological phenomena.

Keywords: model, modeling methods, classical approach, system approach, biological data.

Введение

В XXI веке осуществлять переход на более новые уровни понимания и оперирования окружающим миром, особенно это касается сложных биологических систем, поэтому поиск

формальных моделей, закономерностей и алгоритмов, которые позволяют описывать те или иные объекты, системы, процессы, явления является актуальным и важным направлением в современной науке. Как следствие, на данный момент ученые проводят множественные научные исследования, посвященных вопросам их адекватной формализации. Результаты таких исследований крайне важны и практически значимы для всех направлений научных знаний человечества [1].

С середины XX века наблюдается рост и накопление биологических знаний, это связано с изучением строения сложных органических полимеров. Для изучения которых применялись новые информационные технологии, позволяющие хранить и обрабатывать биологические данные. Таким образом биоинформатика позволила преобразовывать, обрабатывать и хранить данные, обеспечивать их доступность, на основе результатов экспериментов проводить статистическую обработку, строить компьютерные и математические модели биологических процессов.

По мере развития ЭВМ, с появлением эффективного математического и моделирующего программного обеспечения увеличилась способность проводить системные исследования, устанавливать эволюционные связи, создавать новые, эффективные методы лечения, использовать современные биотехнологии [2].

С каждым годом увеличивается количество генерируемых биологических данных, и для того чтобы увеличить их качество требуются новые методы и подходы. Раньше при проведении экспериментов у исследователя была определенная гипотеза, и для получения результата он проводил опыты и статистический анализ полученных измерений. При этом важно продумать и максимально правильно сформулировать гипотезу, потому что сам процесс получения экспериментальных данных, как правило, занимает большой промежуток времени и требует больших трудозатрат.

Цель исследования – изучить возможности современных методов моделирования, которые позволяют изучить любой биологический процесс или явление.

Материал и методы исследования

В данный момент у учёных есть возможность в одном эксперименте обрабатывать огромные массивы данных, что повлияло на дизайн исследований. Стало возможным одновременно проводить тестирование множества гипотез. В экспериментальной биологии это постоянно используется [3,4].

Все эволюционные биологические процессы можно представить в виде простых объектов при помощи моделирования. Для этого было разработано современное научное оборудование и новые технологии.

При моделировании систем нашли применение два подхода классический и системный [5].

В середине XX в. для изучения разных объектов и для модельного представления сложных систем использовали классический подход. В этом подходе реальный изучаемый объект, разбивается на подсистемы и выбираются модельные данные и параметры. Модель в классическом подходе – это сумма всех компонент, при этом каждая компонента выполняет свои задачи и не связана с другими частями модели.

Для существующих простых систем, где внутренние связи между компонентами допустимо не учитывать, можно применять классический подход. У данного подхода есть две отличительные стороны, во-первых, в процессе создания модели наблюдается движение от частного к общему, во-вторых, созданная модель получается путём сложения всех её компонент, при этом не учитывается системный эффект.

Более современным на данный момент является системный подход. Он имеет методологическую концепцию, которая учитывает все связи (внутренние и внешние) между компонентами объекта изучения, также другими объектами и окружающей средой [6].

Для исследования свойств и структуры системы применяются функциональные и структурные подходы.

Алгоритмы поведения системы, её свойства и функции рассматриваются при функциональном подходе, а при структурном подходе определяется состав и связи отдельных элементов системы [7].

Со временем объекты моделирования всё более усложняются и возникает потребность в их более современном, продвинутом наблюдении. Система в системном подходе рассматривается, как интегрированное целое. Особая важность определить структуру системы, её набор связей и взаимодействий между различными элементами [8].

В данный момент выделяют пять методов моделирования: знаковое, предметное, аналоговое, мысленное и модельный эксперимент.

При знаковом моделировании в качестве моделей используются различные виды знаковых преобразований, например, формулы, графики, чертежи, схемы и т.п. Знаковые модели по способу реализации разделяются на компьютерные и некомпьютерные.

При предметном моделировании модель воспроизводит характеристики объекта (физические, геометрические, функциональные, динамические).

При аналоговом моделировании модель и объект описываются формально одинаково (структурными и логическими схемами, одними и теми же математическими соотношениями).

При мысленном моделировании модель приобретает наглядный, символический и математический вид. Это применяется в тех случаях, когда модели не реализуемы, либо нет возможности их физического создания.

При модельном эксперименте вместо самого объекта в эксперименте принимает участие его модель [9].

К методам моделирования относятся натуральное, физическое и математическое.

Натурное моделирование представляет эксперимент, который проводится на самом объекте исследования, то есть объект изучения сам служит для себя моделью.

Физическое моделирование представляет эксперимент, проводящийся на определенных установках, позволяющих сохранить природу явлений, но при этом в измененном масштабе.

Математическое моделирование использует модели, которые имеют сходное математическое описание, но физическая природа модели отличается от моделируемого объекта [10].

Существует классификация методов моделирования, которая делит их на четыре группы: аналитические, численные, имитационные и вероятностно-статистические.

Аналитические методы моделирования нашли применение для решения ограниченного класса задач, так как большинство реальных систем не имеют точного, законченного математического описания, при этом часто при выводе формул применяются допущения, но аналитические методы позволяют дать более точные значения различных характеристик системы. Для этого нужно решить системы уравнений, которые позволят рассчитать характеристики системы на выходе.

Численные методы моделирования основаны на преобразовании модели к математическим уравнениям, которые решаются методами вычислительной математики. Данным методом можно решить большое количество задач. Так как на выходе с заданной точностью мы получаем мы получаем приближенные значения выходных характеристик.

Имитационное моделирование используется в основном для анализа систем, в которых преобладают стохастические воздействия. Во время имитационного моделирования происходит имитация процесса функционирования и жизнеспособности системы во времени. Обязательным условием является сохранение последовательности и продолжительности операции, логической структуры, как в системе оригинале [11]. Часто имитационное моделирование находит применение, когда эксперимент на реальном объекте провести нет возможности, либо это слишком затратно, когда есть необходимость воспроизвести поведение системы во времени и когда нет возможности провести аналитическое моделирование. В имитационном моделировании выделяют несколько подходов:

- Дискретно-событийное моделирование;
- Системная динамика;
- Агентное моделирование.

Дискретно-событийное моделирование представляет собой процесс формирования имитационной модели на основе последовательности операционных действий для точного

построения динамической системы, который позволяет выявить все внешние и внутренние факторы, оказывающие влияние на ее функционирование.

Основой дискретно-событийного моделирования является последовательная хронологическая разработка системы на основе процессных элементов, отраженных временными рамками (лагами). Дискретно-событийное моделирование в данный момент очень развито и имеет большую сферу применения от логистики и систем массового обслуживания до транспортных и производственных систем. Этот вид моделирования наиболее подходит для моделирования производственных процессов.

Системная динамика — парадигма моделирования, где для исследуемой системы строятся графические диаграммы причинных связей и глобальных влияний одних параметров на другие во времени, а затем созданная на основе этих диаграмм модель имитируется на компьютере. Системная динамика позволяет моделировать сложные системы на высоком уровне абстракции, не принимая в расчет мелкие детали: индивидуальные свойства отдельных продуктов, событий или людей. Такие модели позволяют получить общее представление о системе и хорошо подходят для стратегического планирования. С помощью системной динамики строят модели бизнес-процессов, развития города, модели производства, динамики популяции, экологии и развития эпидемии [12].

Агентное моделирование — это направление в имитационном моделировании, которое применяется для исследования децентрализованных систем, которые функционируют по принципу активности отдельных элементов системы, которые в целом формируют глобальные законы и правила. Основной целью агентного моделирования является получение сведений о глобальных правилах и законах, по которым существует и развивается система, состоящая из многих отдельных компонентов. При этом агентом является некая сущность, которая обладает активностью, автономным поведением, может принимать решения в соответствии с некоторым набором правил, взаимодействовать с окружением, а также самостоятельно изменяться [9, 11].

Для решения различных задач проектирования и изготовления изделий, их контроля, а также для точности при исследованиях и расчетах процессов и оборудования, определения суммарных погрешностей изготовления изделий, размерных цепей, при разработке и выборе статистических методов контроля качества изделий применяются вероятностно-статистические модели [13].

Среди большого количества возможных вероятностно-статистических моделей многомерные статистические методы не без оснований позволяют выбрать ту, которая наиболее всего соответствует исходным статистическим данным, которые показывают реальное поведение исследуемой совокупности объектов. Так же эти методы позволяют оценить точность и

надежность выводов, которые можно сделать на основании ограниченного статистического материала [14].

В основу классификации видов моделирования можно положить различные признаки [15]. Моделирование в зависимости от характера изучаемых процессов в системе может быть разделено на статическое и динамическое, детерминированное и стохастическое, дискретное и непрерывное.

Для исследования систем, поведение которых можно предсказать и точно описать применяют детерминированное моделирование, то есть в этих системах протекает детерминированный процесс, описываемый детерминированной моделью.

Если состояние системы зависит от контролируемых и от неконтролируемых воздействий, либо в этой системе есть источник случайности, то следует применять стохастическое моделирование. Все системы, включающие в себя человека, относятся к стохастическим системам.

Для описания систем в какой-либо конкретный момент времени применяют статическое моделирование.

Если происходит изменение системы во времени, когда выходные характеристики системы в настоящий момент времени определяются характером входных воздействий необходимо применять динамическое моделирование. Все виды социальных, экономических, биологических систем являются примером динамических систем [12].

Для исследования систем, в которых изменение и изменение во времени входных и выходных характеристик происходит дискретно необходимо применять дискретное моделирование, в противном случае нужно применяют непрерывное моделирование.

В последние 20 лет наблюдается стабильный рост и развитие компьютерных и информационных технологий. Это увеличивает возможность моделирования различных сложных, реальных объектов наблюдения, так появился новый тип – имитационное моделирование [14].

При помощи имитационного моделирования разрабатываются компьютерные модели, с которыми проводятся эксперименты вместо работы с реальными системами и объектами.

Имитационное моделирование нашло применение, когда не представляется возможным построить аналитическую модель системы, которая учитывает стохастические переменные, причинные связи и последствия. Имитационное моделирование отслеживает поведение системы во времени, при этом оно позволяет учитывать изменения внешних и внутренних условия, которые влияют на развитие сценария.

Необходимо отметить, что имитационное моделирование является высокоуровневой, информационной, компьютерной технологией. Наибольшее применение находит в моделировании сложных систем [11].

Результаты исследования и их обсуждение

Перед тем, как выбрать подходящий метод моделирования необходимо провести исследование моделируемой системы и определить её цели.

У каждой живой системы есть специфические особенности, которые нужно учитывать при моделировании [15].

Необходимо помнить, что все биологические системы сложные и многокомпонентные. Они обладают пространственной структурой с индивидуальными элементами.

Одно из свойств каждой живой системы – это способность к размножению (авторепродукции). Живые системы перерабатывают органику и неорганику для биосинтеза макромолекул, клеток и организмов.

Важное значение в развитии сложных пространственно-временных режимов выполняют процессы переноса, например, диффузия, гравитация, электромагнитные поля, движение цитоплазмы в клетках, и взаимодействия биологических компонентов.

Все биологические системы открыты, так как они сохраняют свою устойчивость при постоянном поступлении из окружающей среды в нее энергии и вещества, и описываются нелинейными уравнениями, также они имеют сложную систему регуляции на всех уровнях [10].

Заключение

Все биологические системы обладают специфичностью и требуют применения адекватных математических методов. За время многолетних исследований в области биологии был накоплен большой пул информации и проведено большое количество опытов по применению существующих математических моделей. В данный момент времени натурный эксперимент довольно дорогостоящ и требует больших временных затрат, поэтому постановка машинных экспериментов всё более актуальный и наиболее часто применимый, так как позволяет работать со сложными математическими моделями и обрабатывать большие массивы данных на компьютерной технике. Поэтому дальнейшее развитие математического моделирования видится на пути создания новых информационных технологий как инструмента построения содержательных моделей, накопления и хранения информации, полученной в результате исследования этих моделей [9].

Список литературы

1. Еськов В.М. Физика и теория хаоса-самоорганизации в изучении живого и эволюции разумной жизни // Сложность. Разум. Постнеклассика. 2013. № 2. С.77-95.
2. Колчанова Н. А., Гончарова С. С., Лихошвая В. А., Иванисенко В. А. Системная компьютерная биология. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. 769 с.
3. Karczewski K. J., Snyder M. P. Integrative omics for health and disease // Nat. Rev. Genet. 2018; 19(5): 299–310. DOI: 10.1038/nrg.2018.4.
4. Матросов В.М., Матросов И.В. Глобальное моделирование с учетом динамики биомассы и сценарии устойчивого развития. / Новая парадигма развития России (Комплексные исследования проблем устойчивого развития). – М.: Academia, МГУК, 1999, с. 18-24.
5. Кузнецов В.В., Бабуров С.В. и др. Системный анализ в фундаментальных и прикладных исследованиях. Санкт-Петербург: Изд-во Политехника, 2014. 378 с.
6. Денисов А.А., Колесников Д.Н. Теория больших систем управления // Учеб. пособие для вузов. Л. Энергоиздат, 1982. 288 с.
7. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. М.: ЮРАЙТ, 2015. 344 с.
8. Форрестер Д. Индустриальная динамика. – М.: Прогресс, 1971.
9. Кориков А.М., Павлов С.Н. Теория систем и системный анализ // Учебное пособие. Изд-во НИЦ ИНФРА-М, 2022. 288 с.
10. Смиряев А.В., Исачкин А.В., Панкина Л.К. Моделирование в биологии и сельском хозяйстве // Учеб. пособие. Издание 3-е исправленное. М.: Издательство РГАУ-МСХА, 2015. 153 с.
11. Эльберг М.С., Н. С. Цыганков. Имитационное моделирование // Учеб. пособие. Красноярск.: Сиб. федер. ун-т. 2017. 128 с.
12. Скоринкин А.И. Математическое моделирование биологических процессов. Казань: Казан. ун-т, 2015. 86 с.
13. Матвеев А.И. Математические методы системного анализа // Учеб. пособие. М.: Изд-во Лань, 2021. 128 с.
14. Маликов, Р. Ф. Практикум по имитационному моделированию сложных систем в среде AnyLogic 6 // Учеб. пособие. Уфа: Изд-во БГПУ, 2013. 296 с.
15. Perez-Riverol Y., Zorin A., Dass G. et al. Quantifying the impact of public omics data // Nat. Commun. 2019; 10(1): 1–10. DOI: 10.1038/s41467-019-11461-w.