

В. С. Тимонов, В. В. Суслов, А. В. Брянская, В. М. Ефимов, Н. А. Колчанов

Институт цитологии и генетики СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 10, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: viimonov@bionet.nsc.ru

ПОДХОД И ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ОПИСАНИЯ МАКРО- И МИКРОДИНАМИКИ ЭКОСИСТЕМ *

Представлен подход и усовершенствованный программный пакет для визуальной реконструкции и анализа сетевых моделей экологических систем – EcoNetStudio. Особенностью работы с такими системами является нечетко формализованная терминологическая база. Для реконструкции сетевых моделей экосистем предложена компьютерная онтология описания их макро- и микродинамики. Проведена апробация программного пакета и онтологии на примере реконструкции структурно-функциональной организации одного из озер Новосибирской области.

Ключевые слова: сетевое моделирование, экологические системы, экосети, EcoNetStudio.

Введение

Любая экологическая система динамична, но исходные данные, на которые опирается моделирование динамики, сильно зависят от размерного класса рассматриваемой экосистемы и применяемого подхода к выделению экосистемы. При моделировании экосистем большого размерного класса, где на первый план выходит сам факт наличия круговорота веществ (в частности углерода) на определенной территории, доминирует функциональный подход. Основные блоки, между которыми происходит перенос вещества, в моделях стандартизированы (например, литомассы, педомассы, мортмассы, биомассы, водные массы и аэромассы) и отражают обобщенные показатели, полученные на основе характеристик, снятых через определенные промежутки времени с различных участков земной поверхности, горизонтов почв, аэромасс и т. д. Поэтому дальнейшая детализация блоков часто нецелесообразна или невозможна из-за фрагментарности и / или отсутствия данных для выделяемых подблоков.

Разумное приближение к портретной детализации, определяемое задачами моделирования, остается актуальным для экосистем малой размерности или экосистем, включающих ограниченное число объектов или рангов объектов (например, озеро, участки древостоя), взаимодействия между которыми могут быть измерены и / или оценены. Так, сукцессионная система является гомеостатированным сообществом из особей определенных видов (жизненных форм), жизнедеятельность которых определяют характер сукцессии в данных условиях [1]. Особенностью работы с такими системами является нечетко формализованная терминологическая база. Стандартизация в данном случае должна касаться не набора выделяемых блоков, а онтологии – описания предметной области. Гибкая онтология позволяет аккумулировать описания различных экосистем и применять для их анализа стандартные методы (химико-кинетический подход [2], методы теории графов, сетей Петри и т. д.).

Было проведено совершенствование функциональных возможностей и апробация визуального средства реконструкции и анализа сетевых моделей экологических систем – EcoNetStudio [3]. В частности, работы велись в следующих направлениях.

- Построение универсальной компьютерной онтологии для описания макро- и микродинамики экосистем. Необходима комплексная онтология для полуавтоматического *in silico* описания сетевых моделей экологических систем и дальнейшей разработки / адаптации методов их анализа.

* Работа поддержана интеграционным проектом СО РАН № 50 «Модели изменения биосферы на основе баланса углерода (по натурным и спутниковым данным и с учетом вклада бореальных экосистем)».

- Определение правил для описания экосетей с учетом двудольного направленного представления их графов, необходимого для анализа существующими в открытом доступе алгоритмами.
- Апробация созданной комплексной онтологии в рамках реальных прикладных задач. Описана качественная модель одного из содово-соленых озер Новосибирской области с указанием различных показателей (рангов).
- Разработка подсистемы информационной интерактивной поддержки для пользователей EcoNetStudio на базе универсальной компьютерной онтологии для описания макро- и микродинамики экосистем.

Универсальная компьютерная онтология

В 2006 г. были предложены концептуальные онтологии для описания макродинамики (изменение структуры графа взаимодействий в экосистеме) и микродинамики (фиксированная структура графа экосистемы при изменении «веса» отдельных ребер или вершин) экосистем [4]. Прямое перенесение этих онтологий в компьютерную информационную систему вызвало трудности, связанные с невозможностью реконструкции сетевой модели экосистемы с помощью двух онтологий одновременно. Таким образом, возникла потребность в разработке общей универсальной компьютерной онтологии. В ходе ее разработки были выявлены ключевые объекты в обеих концептуальных онтологиях описания макродинамики и микродинамики экосистем, обобщены и уточнены различия ключевых объектов.

В результате была разработана компьютерная онтология для комплексного описания макро- и микродинамики экосистем (рис. 1).

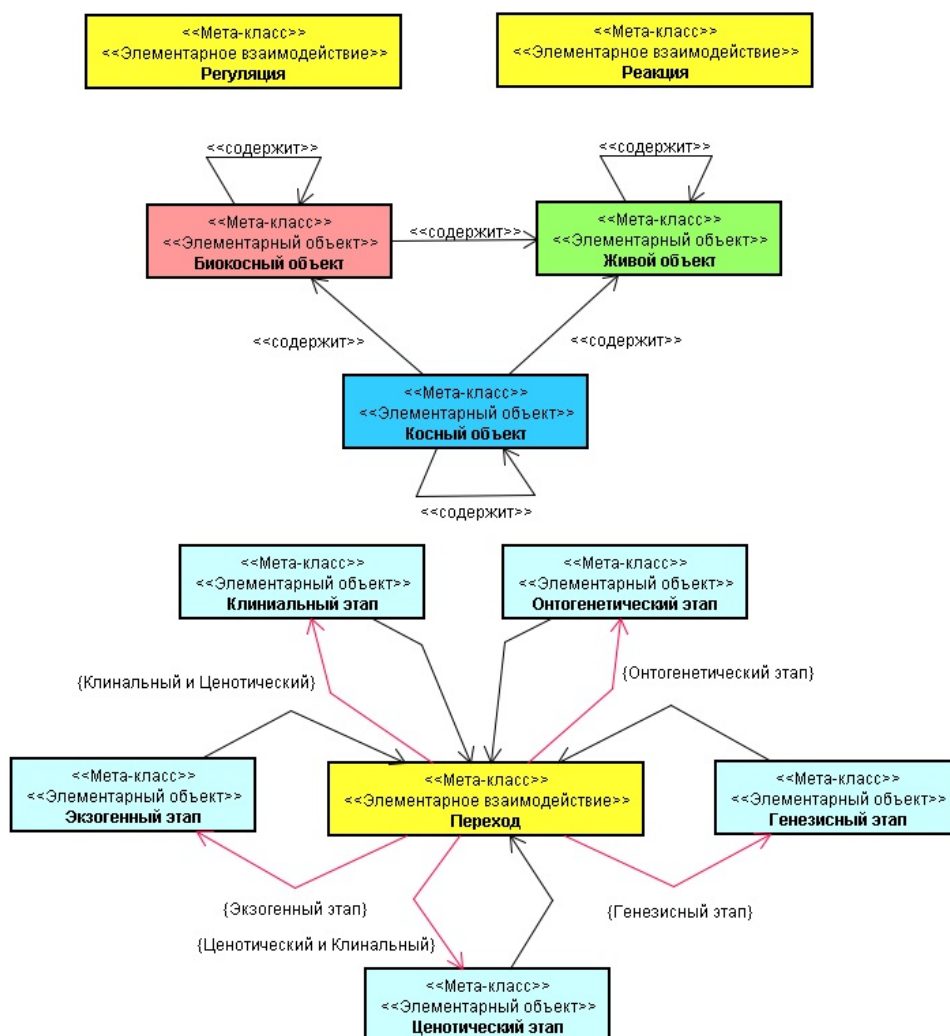


Рис. 1. Часть разработанной онтологии для описания макро- и микродинамики экосистем

Онтология делится на элементарные объекты (ЭО) и элементарные взаимодействия (ЭВ) между ними и включает следующие объекты:

- макро- и микродинамику (косный объект, живой объект, биокосный объект);
- только макродинамику (экзогенный, ценогический, генезисный, онтогенетический, клиниальный этапы);
- взаимодействия (реакция, регуляция, переход).

Каждый из объектов онтологии обладает набором рангов (атрибутов), характеризующих элементы сетевой модели (уникальные параметры). Реакции и регуляции обладают характером взаимодействий (трофическая, информационная, онтогенетическая и т. п.), которые можно уточнять и расширять с помощью специализированного средства – *Ontology Manager* [3]. Всего насчитывается порядка 10 типов взаимодействий для реакций и 5 типов для регуляций. Для описания сетевых моделей экосистем с учетом их макродинамики было сохранено понятие этапов.

Для более точного и корректного описания сетевых моделей была задействована верификационная политика, заключающаяся в определении возможных взаимодействий между объектами онтологии: 1) живой объект может содержать в себе только живые объекты; 2) биокосный объект может содержать в себе только живой и биокосный объекты; 3) косный объект может содержать в себе все доступные объекты, кроме этапов. Для этапов, относящихся к описанию макродинамики экосистемы, определены следующие ограничения: 1) экзогенный этап переходит только в себе подобный; 2) генезисный этап переходит только в генезисный; 3) ценогический и клиниальный этап могут переходить в себе подобный, также друг в друга; 4) онтогенетический этап переходит в себе подобный.

Опыт отдела системной биологии ИЦиГ СО РАН в области реконструкции и анализа сетевых моделей молекулярно-генетических систем (генных сетей) [5] показал, что граф, отображающий модель сетевой модели (генной сети, экосистемы и др.) должен иметь вид двудольного направленного графа: лишь в таком виде сеть может быть проанализирована общепринятыми, существующими в открытом доступе алгоритмами, основанными на теории графов (поиск регуляторных контуров и т. д.). С учетом этого на разработанную онтологию были наложены правила, определяющие четкое возможное взаимодействие между элементами сетевой модели, описывающей экосистему. Правила предусматривают автоматическое разделение объектов онтологии на два множества, одно из которых включает объекты и этапы, а другое – взаимодействия между ними с помощью реакций, регуляций и переходов. Такой подход уменьшает вероятность появления коллизий при описании сетевой модели экосистемы, упрощает разработку / адаптацию проблемно-ориентированных методов анализа и позволяет их повторно использовать при анализе прочих реконструированных моделей экологических систем.

Применение компьютерной онтологии для описания макро- и микродинамики экосистем

Мы приведем пример реконструкции структурно-функциональной организации экосистемы содово-соленого озера № 48 на основе сетевого моделирования.

Это озеро входит в группу 10 озер Купинского и Баганского районов Новосибирской области. Озера входят в Чано-Кулундинскую область, разделенную на Западно-Барабинский, Восточно-Барабинский и Кулундинский геоморфологические районы [6] (рис. 2). Реконструированная сетевая модель, построенная на основе ранее описанной онтологии, представлена на рис. 3.

Модель (см. рис. 3, центральная панель) включает в себя следующие объекты:

- озеро (компартмент);
- водная масса (компартмент);
- иловая масса (компартмент);
- микробное сообщество (компартмент);
- 7 горизонтов (слоев) ила (каждый слой – компартмент);
- процессы переноса углерода;
- обменные геохимические процессы.

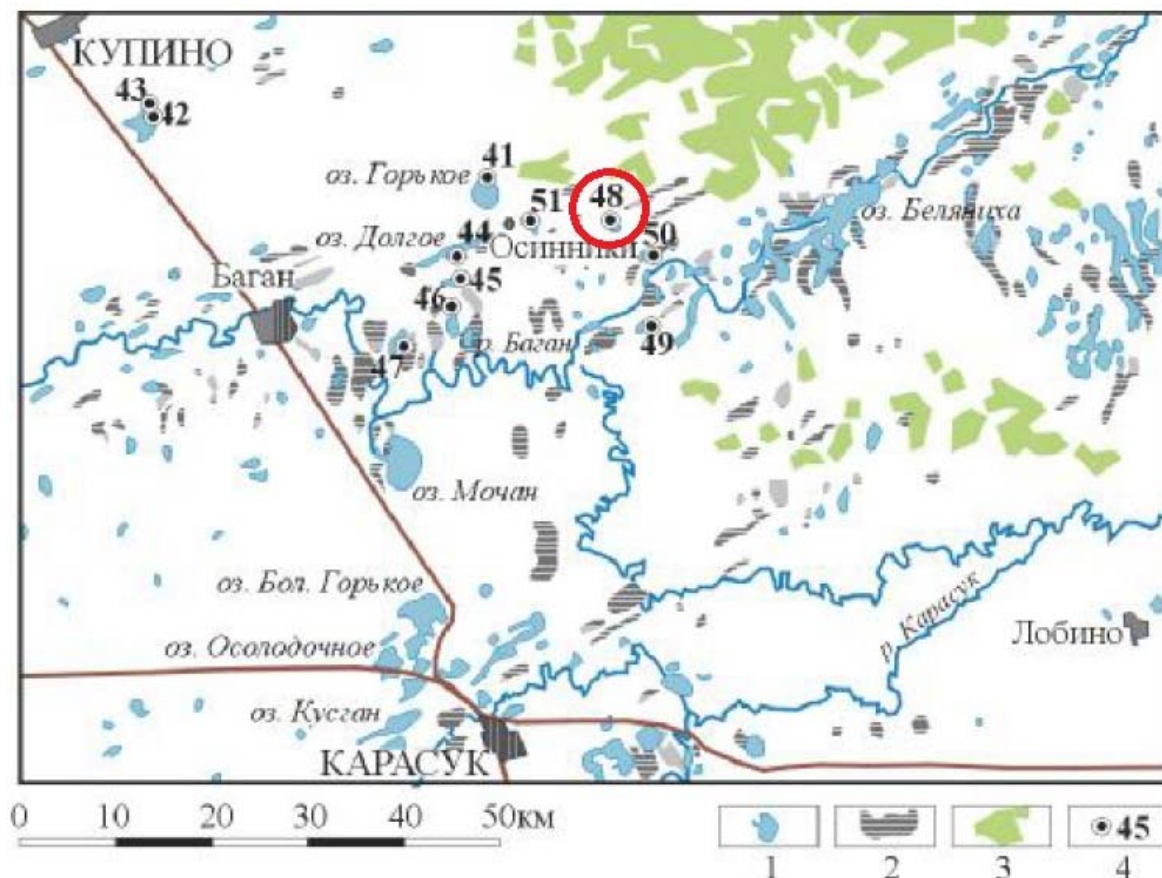


Рис. 2. Карта-схема района исследований (солёные озера Купинского и Баганского районов Новосибирской области) с указанием озера № 48

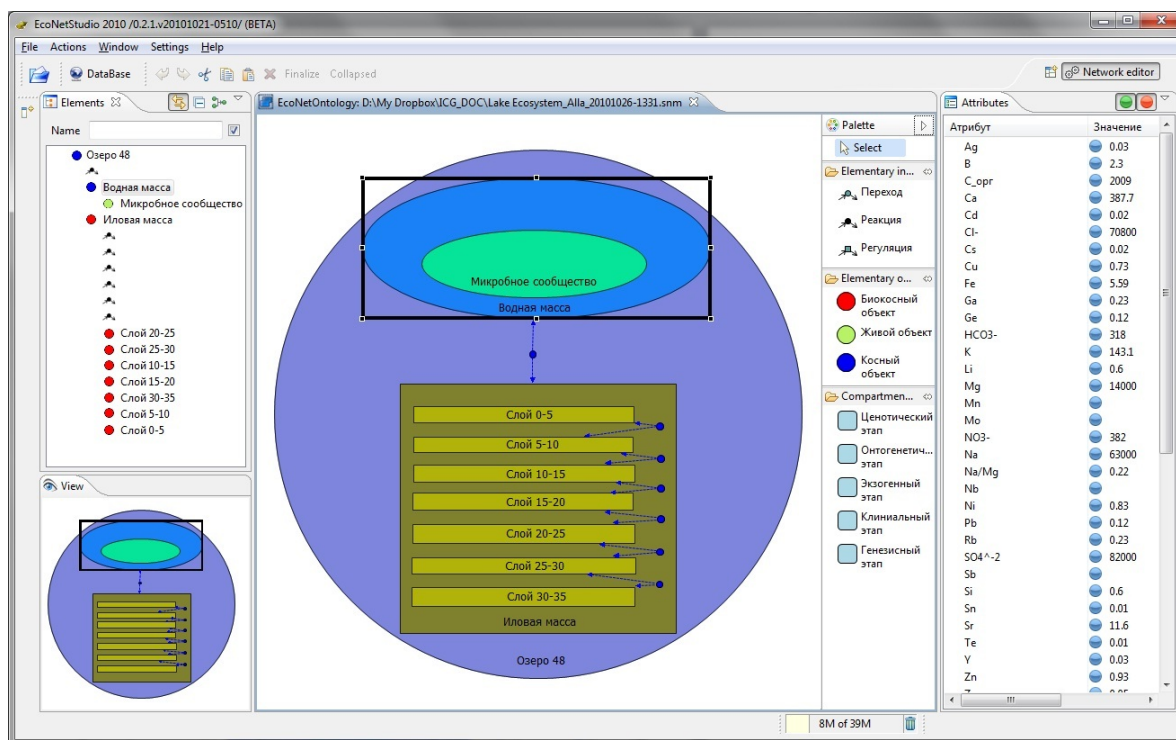


Рис. 3. Сетевая модель экосистемы озера № 48, созданная в EcoNetStudio

Для иерархического описания экосистемы был применен компартментный подход, полностью поддерживаемый разработанной нами компьютерной онтологией описания макро- и микродинамики экосистем (см. рис. 3, панель Palette). Каждому из представленных объектов и связей в настоящее время приписываются полученные в ходе полевых исследований количественные показатели (концентрация веществ и микроорганизмов) (см. рис. 3, панель Attributes), ведется уточнение параметров сетевой модели с целью более подробного описания изучаемой экосистемы и ее дальнейшего анализа.

Подсистема информационной интерактивной поддержки

Для облегчения освоения EcoNetStudio пользователем была разработана интерактивная подсистема помощи по работе с программным продуктом (рис. 4).



Рис. 4. Интерактивная подсистема помощи (блок начального освоения программы)

Она помогает в короткие сроки освоить принципы работы с программой. Подсистема частично учитывает верификационную политику, заданную в онтологии описания макро- и микродинамики экосистем, что делает ее использование достаточно эффективным. При расширении набора рангов или терминологии онтологии проводится полуавтоматизированная адаптация подсистемы.

Технологическая основа

Реализация программных средств проводилась преимущественно с использованием технологий Java и Eclipse RCP¹ [7]. Таким образом, предоставляется возможность универсальной работы разработанного приложения в различных операционных средах (Windows, Linux, MacOSX) без существенного изменения исходных кодов. Применение модульного подхода разработки с учетом идеологии Eclipse RCP позволяет гибко и быстро модифицировать модули технологии, а также осуществлять между ними удобное и эффективное взаимодействие.

Ключевой элемент при реализации EcoNetStudio – использование технологии Araneus², созданной в отделе системной биологии ИЦиГ СО РАН. Технология предназначена для быстрой разработки различных предметно-ориентированных средств визуальной реконструкции и анализа сетевых моделей. В Araneus присутствует ключевая возможность определения и

¹ См. подробнее: Eclipse Rich Client Platform Home URL: <http://www.eclipse.org/rcp/>.

² Получено авторское свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2009611761.

расширения описания конкретной предметной области (онтологии) непосредственно исследователями без участия IT-специалистов. Это позволяет обеспечить необходимую своевременную инструментальную поддержку исследований. В будущем такие средства позволят проводить междисциплинарные исследования.

Заключение

Усовершенствованный программный пакет EcoNetStudio в совокупности с новой компьютерной онтологией предоставляет исследователям широкие возможности по визуальной реконструкции и анализу сетевых моделей экологических систем на различных уровнях их организации, с учетом внешних воздействий и различного функционирования в рамках сезонных и других этапов.

Проведена успешная апробация EcoNetStudio на ряде прикладных задач. В их числе реконструкция структурно-функциональной организации одного из содово-соленых озер Новосибирской области.

Список литературы

1. *Разумовский С. М.* Закономерности динамики биогеоценозов. М.: Наука, 1981. 231 с.
2. *Лихошвай В. А., Ратушный А. В., Бажан С. И.* и др. Методы моделирования динамики молекулярно-генетических систем // Системная Компьютерная биология / Под ред. Н. А. Колчанова, С. С. Гончарова, В. А. Лихошвай, В. А. Иванисенко. Новосибирск, 2008. С. 333–396.
3. *Тимонов В. С., Мигинский Д. С., Колчанов Н. А.* Технология реконструкции и анализа сетевых моделей экологических систем // Молодежь и современные информационные технологии: Сб. тр. VII Всерос. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск: Изд-во «СПБ Графикс», 2009. Т. 1. С. 335–336.
4. *Сергеев М. Г., Суслов В. В., Мигинский Д. С. и др.* Опыт создания базы данных для описания экосистем с использованием сетевых технологий // Биоразнообразие и динамика экосистем / Под ред. В. К. Шумного, Ю. И. Шокина, Н. А. Колчанова, А. М. Федотова. Новосибирск, 2006. С. 95–116.
5. *Timonov V. S., Gunbin K. V., Turnaev I. I., Genaev M. A., Miginsky D. S.* Regulatory Circuits and Phylogenetic Decomposition in Gene Networks Evolution Research // Proceedings Of The 7th International Conference on Bioinformatics of Genome Regulation and Structure (BGRS'2010). 2010. P. 286.
6. *Брянская А. В., Таран О. П., Симонов В. А. и др.* Геохимическая и микробиологическая характеристика соленых экосистем Новосибирской области // Экологическая, биотехнологическая, медицинская и теоретическая микробиология / Под ред. В. В. Власова, А. Г. Дегерменджи, Н. А. Колчанова, В. Н. Пармона, В. Е. Репина. Новосибирск: СО РАН, 2010. С. 168–175.

Материал поступил в редколлегию 10.02.2011

V. S. Timonov, V. V. Suslov, A. V. Bryanskaya, V. M. Efimov, N. A. Kolchanov

APPROACH AND SOFTWARE TOOL FOR NETWORK MODELLING OF ECOSYSTEMS DYNAMICS

An approach and improved software tool for visual reconstruction and analysis of ecological systems network models – EcoNetStudio is presented. The indistinct formalized terminological basis is a feature of ecological systems. A computer ontology that supports description of macro- and microdynamics of such systems was created in order to reconstruction of ecological systems network models. Approbation of EcoNetStudio and computer ontology was carried out on a lake model.

Keywords: network modeling, ecological systems, econet, EcoNetStudio.