

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АГЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ РЕАКЦИИ-ДИФФУЗИИ

Ключников Е.П., Жмуров А.А.

Московский физико-технический институт(ГУ), Лаборатория компьютерного и математического моделирования биологических систем, Россия, 141704, Долгопрудный, Институтский пер., 9

Агентное моделирование – метод имитационного моделирования *in silico*, в котором система представляется в виде набора взаимодействующих структурных единиц (агентов). В качестве агентов могут выступать элементы различного размера и уровня организации: от атома до целого организма. Это позволяет изучать различные биологические системы: от отдельных молекул до популяций клеток [1].

В данной работе был разработан программный пакет для агентного моделирования биологических задач реакции-диффузии. Механические взаимодействия между агентами описывались потенциалом Леннарда-Джонса. Помимо механических взаимодействий, были введены следующие реакции: реакция катализа, реакция деления(распада) агента, реакция аннигиляции или смерти, обратимая реакция образования комплексов агентов и реакция, описываемая уравнением Михаэлиса-Ментена: $A+B \leftrightarrow AB \rightarrow C+B$.

Полученный программный пакет был апробирован рядом задач. В первой задаче система состояла из агентов одного типа, что позволило рассмотреть диффузию белка в густонаселенной среде клетки. Как результат, было показано, что с ростом концентрации белка диффузия замедляется. В следующей задаче в систему был добавлен агент второго типа, благодаря чему были смоделированы задачи разделения фаз и кристаллизации. В третьей задаче в системе была обновлена модель поведения: были добавлены реакции простого и ферментативного катализа. Это позволило рассмотреть каскад реакций внутреннего пути сворачивания крови. Была показана лавинообразная природа образования фибрина и других факторов. Характерные времена так же хорошо сопоставляются с экспериментальными данными [2]. В качестве последней задачи была построена агентная модель роста популяции раковых клеток [3]. В результате восемнадцатилетней эволюции из небольшого количества раковых клеток была получена большая колония клеток шарообразной формы с некротическим ядром внутри.

Литература

1. An G., Mi Q., Dutta-Moscato J., Vodovotz Y. Agent-based models in translational systems biology // Wiley Interdiscip. Rev.: Syst. Biol. Med. 2009. V. 1, N 2. P. 159–171.
2. Smith G. F. Fibrinogen-fibrin conversion. The mechanism of fibrin-polymer formation in solution // Biochem. J. 1980. V.185, N 1, P. 1-11.