

CAD-СИСТЕМА МОДЕЛЮВАННЯ БІОПОДІБНИХ СТРУКТУР

Жихаревич В.В., Газдюк К.П.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
м. Чернівці*

Останнім часом активно розробляються різноманітні засоби, призначені для імітаційного моделювання живих організмів або їх складових. Основною метою створення подібних систем є надання зручного інструментарію науковцям, які досліджують широкий спектр біологічних процесів: від синтезу органічних молекулярних структур до закономірностей розвитку та поведінки мікроорганізмів.

Відомі сучасні розробки передбачають моделювання лише окремих специфічних аспектів біопроектів або окремих організмів. На фоні цього досить актуальною є проблема створення універсального зручного програмного засобу, що надавав би можливість формування найрізноманітніших біоподібних об'єктів, навіть таких, які взагалі не існують сьогодні на нашій планеті.

Універсальність та зручність програмного засобу моделювання обумовлює необхідність його побудови на основі досить простих та універсальних методів. Одним із таких, на нашу думку, є метод рухомих клітинних автоматів (РКА). Даний метод розроблявся для задач моделювання механіки суцільних середовищ, зокрема різного роду деформацій, дефектоутворення та руйнувань, але він є досить зручним для реалізації моделей біоподібних структур. Органічні молекулярні комплекси методом РКА можуть бути змодельовані аналогічно методам молекулярної динаміки, одноклітинні організми можуть бути представлені також на псевдомолекулярному рівні (цитоскелет у вигляді ланцюгів та мереж з РКА, мембрана як множина РКА у вигляді шару із різноманітними включеннями тощо), а багатоклітинні мікроорганізми природнім чином слід представляти множинами РКА, що імітують відповідні клітини та їх динаміку.

Основна проблематика такого підходу – задання правил клітинно-автоматних взаємодій, які б відображали поведінку модельованих ними складових фрагментів. Від набору цих правил залежить макродинаміка досліджуваної біоподібної структури. В рамках розроблюваної нами CAD-системи для моделювання, яку ми назвали "Bio-Like Structure Design" (BLSD), модуль формування правил РКА-взаємодій є центральною частиною. Формування здійснюється шляхом комбінації елементарних правил, що імітують відповідні процеси, з досить широкого спектру: від теплових коливань атомів до ділення та диференціації клітин.