

УДК 51-72., 541.64
ББК 22.352

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ЛОТКИ-ВОЛЬТЕРА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДВУХ ПАРАМЕТРОВ В БИОМАТЕРИАЛЕ

Умаров Насимджон Негматович - кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики и твёрдого тела ГОУ “ХГУ имени академика Бободжана Гафурова”, e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

ИСТИФОДАИ МОДЕЛИ ЛОТКА-ВОЛТЕР БАРОИ ОМУЗИШИ ТАЪСИРИ МУТАҚОБИЛАИ ДУ ПАРАМЕТРҲО ДАР БИОМАТЕРИАЛҲО

Умаров Насимҷон Негматович - номзади илмҳои физикаю-математика, мудири кафедраи физикаи умумӣ ва ҷисмҳои сахти МДТ “ДДХ ба номи академик Бобоҷон Гафуров”, e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

APPLICATION OF LOTKI-VOLTER MODEL FOR THE STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN TWO PARAMETERS IN BIOMATERIAL

Umarov Nasimjon Negmatovich - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of General Physics and Solid State of the PEI “KSU named after academic Bobojon Gafurov”, e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

Ключевые слова: биоматериал, математическое моделирование, уравнение Лотки-Вольтера, гидроксильная группа, активные радикалы, тростник обыкновенный.

В статье изучается применение модели Лотки-Вольтера при взаимодействии двух и более параметров. Установлено, что при взаимодействии двух параметров или систем колебания взаимодействия повторяются как колебания гармонического осциллятора. Выявлено, что когда число взаимодействующих параметров увеличивается, то амплитуда колебания монотонно уменьшается. Модель Лотки-Вольтера можно применить для моделирования взаимодействия активных радикалов и гидроксильных групп в составе биомолекул стебля тростника. Определено, что по мере роста уровня радиационного фона увеличиваются активные радикалы до 2,5 раз, а гидроксильная группа уменьшается до трёх раз. Моделирование этого процесса надёжно обеспечивает управление и прогнозирование изменения свойств и структуры биоматериалов.

Вожаҳои калидӣ: биомавод, моделсозии математикӣ, муодилаи Лотки-Волтер, гурӯҳи хидроксилӣ, радикалҳои фаъол, қамиши оддӣ.

Дар мақола татбиқи модели Лотка-Волтер ба таъсири мутақобилаи ду ҷиёда параметрҳо омӯхта шудааст. Муқаррар карда шудааст, ки ҳангоми ба ҳамдигар таъсир расондани ду параметр ҷиёда система, лапшиҳои онҳо ҳамчун лапшии осциллятори гармоникӣ такрор мешаванд. Муайян карда шуд, ки дар суръати зиёд шудани шумораи параметрҳои ба ҳам таъсиркунанда амплитудаи лапшии ба таври монотонӣ кам мешавад. Модели Лотка-Волтерро барои моделиронии таъсири мутақобилаи радикалҳои фаъол ва гурӯҳҳои хидроксилӣ таркиби биомолекулаҳои пояи қамиши истифода бурдан мумкин аст. Муайян карда шуд, ки дар баробари баланд шудани дараҷаи фони радиационӣ радикалҳои фаъол то 2,5 баробар зиёд ва гурӯҳҳои хидроксилӣ то се баробар кам мешаванд. Моделсозии ин раванд назорат ва пешгӯии тағйиротро дар хосият ва сохтори биоматериалҳо таъмин менамояд.

Keywords: biomaterial, mathematical modelling, Lotki-Volter equation, hydroxyl group, active radical, the reed ordinary.

The article dwells on an application of Lotki-Volter model by interaction of two and more parameters. It is established that by the presence of two parameters or systems the vacillations born by interaction recur as those ones engendered by a harmonious oscillator. His elicited that when a number of interacting parameters increases an amplitude of vacillations is monotonously decreasing. Lotki-Volter model can be applied for modeling an interaction between active radicals and hydroxyl groups in the composition of the reed ordinary biomolecules. It is determined that as much as a growth of radiation background level augments, the quantum of active radicals amounts proportionally up to 2,5 times and a hydroxyl group belittles down to 3 times. The modelling of this process reliably ensures the management and prognostication in regard to the properties and structure of biomaterials dealt with.

Общеизвестно, что в научной практике часто встречаются взаимодействия между двумя параметрами, системами или различными величинами. Для управления и прогнозирования взаимодействия между двумя параметрами или элементами систем широко применяется математическое моделирование. Одним из распространённых методов моделирования систем является модель Лотки-Вольтера, представляющая взаимодействие двух типов: «хищник–жертва» [1-5]. Согласно литературным данным [1-5] уравнение Лотки-Вольтера может быть применено для моделирования систем «хищник–жертва», «червь–растение», «ледник–тепловое течение» и других типов взаимодействий. В научных исследованиях существуют стохастические, непрерывные и дискретные дифференциальные уравнения (модель Лотки – Вольтера) [6-9]. Каждое из уравнений ориентировано на описание и учет тех или иных параметров в процессе взаимодействия и развития биологических систем.

Можно отметить, что в работах [10-12] приведены наиболее подробные исследования, изучающие временную и количественную динамику сообщества «хищник – жертва» на основе модели Лотки -Вольтера. Теоретическая, колебательная характеристика модели Лотки-Вольтера является консервативной системой и обладает первым интегралом движения. Система уравнений учитывает малейшие изменения в правой части (1), которые приводят к качественным изменениям динамического характера.

$$\begin{aligned}\frac{dR}{dt} &= (x - rC)R \\ \frac{dC}{dt} &= (-y + rR)C\end{aligned}\tag{1}$$

Однако, наличие устойчивого предельного цикла, свойственного грубым динамическим системам, способствует значительному расширению области применения модели [3, 4].

Целью настоящей работы является применение уравнения Лотки–Вольтера и для изучения влияния активных радикалов на количество гидроксильных групп в биомолекул стебля тростника обыкновенного. Для определения количество активных радикалов и присоединившихся спиновых меток к гидроксильным группам применён метод электронного парамагнитного резонанса и спиновых меток. Известно, что метод основан с взаимодействием магнитного поля и парамагнитными центрами веществ [13-16].

В качестве объекта исследовано образцов стебля тростника обыкновенного из разных мест произрастания с различными радиационным фоном.

Уравнением Лотки-Вольтера чаще всего решаются проблемы физико-химического, биофизического и экологического направлений [17]. В связи с этим предположим, что начальное количество жертв и хищников колеблется; $R =$ от 3 до 5 и $C =$ от 2 до 3. Предполагается, что жертва (жертвы) увеличивается с коэффициентом $x=1$ без влияния внешних факторов, хищник (хищники) уменьшается с коэффициентом $y=1$. Хищник(и) с коэффициентом $r=1$ взаимодействует с жертвой и увеличивается в объёме или системе. Зависимость количества хищников и жертв от времени определяется системой (1). Данные систему (1) вводим в программу Mathcad:

$$F(t, R) = \begin{pmatrix} xR - rRC \\ -yC + rRC \end{pmatrix}\tag{2}.$$

С помощью системы (2) исследуем взаимосвязь с точки зрения временного интервала от $t_0=0$ до $t_1=14$ недель в $M=400$ точек. Используя метод Рунге-Кутта, создаём график функции

в программе Mathcad [18]. Предположим, что количество хищников ($C=2$) и жертв ($R=5$).

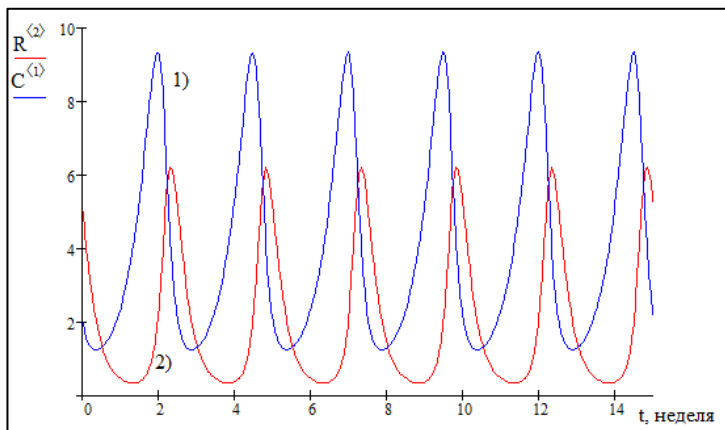


Рис.1 Зависимость количества от хищников ($C=2$) и жертв ($R=5$):

Из рис.1 видно, что по мере изменения количества жертв и хищников вид графика изменяется, то есть количество жертв и хищников взаимодействует между собой и зависит друг от друга. Во время взаимодействия двух параметров, как видно из графика, колебания практически повторяются, по уже как колебания гармонического осциллятора.

Когда на жертву влияет ещё один тип хищников (E), возможно, нарушается баланс. В этом случае уравнение (1) принимает следующий вид (3);

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dt} &= (x - rC)R + E(x) \\ \frac{dC}{dt} &= (-y + rR)C \end{aligned} \quad (3)$$

На рис. 2 приведено взаимодействие трёх параметров, то есть влияния двух типов хищника – C, E – на один тип жертв R .

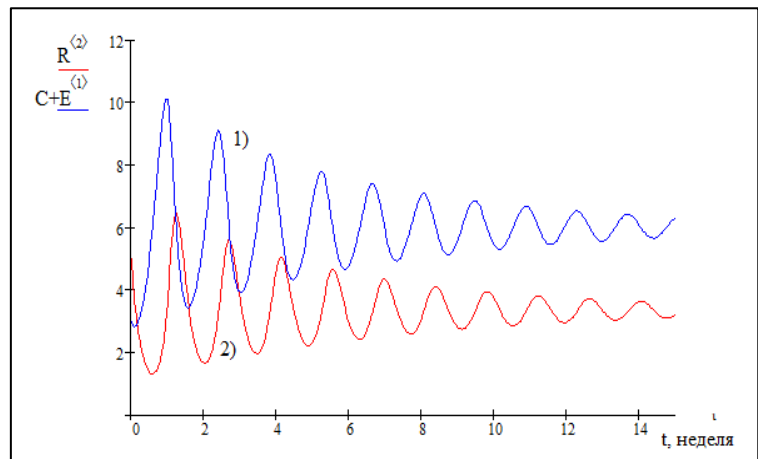


Рис. 2. Взаимодействие двух типов хищников на один тип жертв; $C+E=3; R=5$

Согласно уравнений (3) и рис. 2 видно, что взаимодействия, то есть колебания параметров, монотонно уменьшаются, возможно, с течением времени, после четырнадцатой недели колебания затухают и взаимодействия прекращаются. При этом, очевидно, нарушается баланс и в подследствии, возможно, хищники и жертвы постепенно исчезают.

Если в систему уравнений (3) добавим новый параметр P , то есть ещё один тип жертв, тогда баланс взаимодействия окончательно изменяется и уравнения (1) принимают следующий вид (4):

$$\frac{dR}{dt} = (x - rC)R + E(x) \tag{4}$$

$$\frac{dC}{dt} = (-y + rR)C + P(y)$$

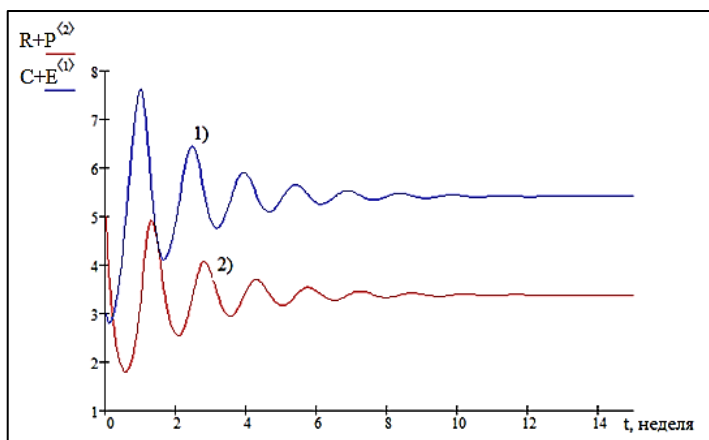


Рис. 3. Взаимодействие двух типов хищников и жертв; $C+E=3$; $R+P=5$

На рис. 3 приведены взаимодействия двух типов хищников с двумя типами жертв. Как видно из графика, в этом случае, очевидно, происходит монотонное уменьшение амплитуды колебаний, а после десятой недели колебания полностью затухают. Ускоренное уменьшение количества хищников и жертв, очевидно, связано с тем, что два типа противоположных параметров (системы) взаимодействуют сильнее и, впоследствии это приведёт к исчезновению типов.

Известно, что внешние и внутренние факторы влияют на структуру и свойства биоматериалов, которые отражаются на ИК- и ЭПР- спектрах. Изменениям спектральных характеристик, то есть структуры и свойств, по мере возрастания доли внешних факторов, посвящены ряд работ [4-6]. В работах [4-6] определено, что по мере роста доза радиационного фона и количества радионуклидов уменьшается количество функциональных групп и молекулярно-динамические параметры.

Как отмечено в настоящей работе, в качестве жертв изучалось количество спиновых меток присоединившихся к гидроксильным группам, а в качестве хищника – количество активных радикалов в составе биомолекул стебля тростника обыкновенного.

Таблица 1

Зависимость количества активных радикалов и спиновых меток присоединившихся к гидроксильным группам, от места произрастания стебля тростника обыкновенного

№	Место сбора образцов	Радиационный фон, мкЗв/час	$R \cdot 10^{16}$ спин/г	$C \cdot 10^{15}$, спин/г
1	пункт А	0.22	20,3	1,24
2	пункт Б	0.76	16,4	2,36
3	пункт В	2.70	6,5	3,15
4	пункт А ₁	0.20	20.6	1.27
5	пункт Б ₁	0.72	17.2	2.34
6	пункт В ₁	2.66	6.9	3.24

Примечание: R – количество присоединившихся спиновых меток, C – количество активных радикалов.

В табл. 1 приведены зависимости количества активных радикалов и присоединившихся спиновых меток от радиационного фона места произрастания. Радиационный фон непосредственно влияет на количество гидроксильных групп и стабильных радикалов. Можно видеть, что по мере роста уровня радиационного фона в структуре стебля тростника количество активных радикалов увеличивается до 2,5 раз, а количества гидроксильных групп уменьшается до 3 – х раз.

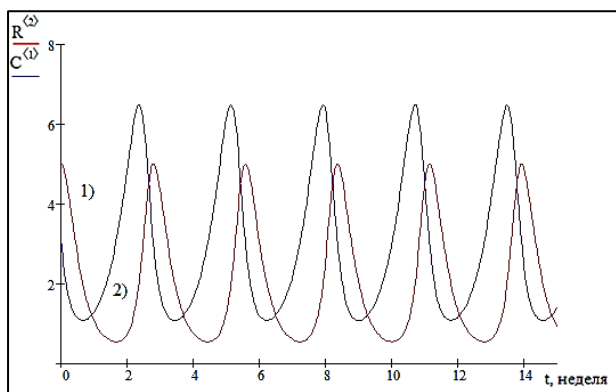


Рис. 4. Зависимость количества гидроксильных групп $R=5\sim(6,5\cdot 10^{16} \text{ спин/г})$, и активных радикалов $C=3\sim(3,15\cdot 10^{13} \text{ спин/г})$ от времени

На рис. 4 показана зависимость количества активных радикалов и гидроксильных групп от времени. В графике красной линией (кривая 1) показана зависимость количества гидроксильных групп, а синей линией (кривая 2) – количество активных радикалов от времени. Предположим, что количество гидроксильных групп равно $R=5\sim(6,5\cdot 10^{16} \text{ спин/г})$, а активных радикалов равно $C=3\sim(3,15\cdot 10^{13} \text{ спин/г})$ из рис. 4 видно, что они взаимодействуют между собой монотонно.

Из табл.1 можно видеть, что по мере роста радиационного фона места произрастания активные радикалы увеличиваются, а количество присоединившихся спиновых меток уменьшается. Увеличение количества активных радикалов приведёт к уменьшению гидроксильных групп, или наоборот, уменьшение активных радикалов приведёт к увеличению гидроксильных групп. На графике процесс увеличения и уменьшения количества активных радикалов и гидроксильных групп повторяется как у гармонического осциллятора. Небольшие изменения в составе, возможно, приводят к качественному изменению поведения систем (рис.2 и 3). Однако, разрушение этого баланса приведёт к разрыхлению структуры и свойств биомолекул растений. Моделирование этого процесса дают возможность изучать и прогнозировать результат взаимодействия двух параметров и управлять структурами и свойствами биомолекул природных соединений.

Таким образом, можно заключить, что уравнение Лотки-Вольтера можно применять для моделирования биофизических процессов в биоматериалах. График взаимодействия двух параметров в системе уравнения Лотки-Вольтера похож на колебания гармонического осциллятора, то есть цикл повторяется. Определено, что также новые параметры, как E (хищник) и P (жертва) влияют на систему и разрушают баланс, то есть, в этом случае амплитуда колебания с течением времени монотонно уменьшается и впоследствии, взаимодействия ослабляются.

По мере воздействия внешних факторов изменяются биофизические свойства макромолекул тростника обыкновенного. Уравнение этих изменений похоже на колебания гармонического осциллятора, отражающего взаимодействия активных радикалов и гидроксильных групп. Если баланс стабилизируется, и количество активных радикалов и гидроксильных групп не изменится, то колебания, возможно, заглушаются. Уклон от состояния равновесия может привести к разрушению баланса количества активных радикалов и гидроксильных групп. Моделирование этого процесса надёжно обеспечивает возможность управления и прогнозирования изменений структуры и свойств биоматериалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ризниченко Г. Ю. Математические модели в биофизике и экологии. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 184 с.
2. Недорезов Л.В., Назаров И.Н. Непрерывно-дискретные модели динамики изолированной популяции и двух конкурирующих видов. Математические структуры и моделирование. Омск: Омский гос. ун-т.1998. Вып. 2. С. 77–91.
3. Беретта Э., Капассо В., Ринальди Ф. Результаты глобальной устойчивости обобщенной системы Лотки—Вольтера с распределенными запаздываниями // J. Math. биол. 1988. Т. 26. №6. С. 661–688.

4. Неймарк Ю.И. Математические модели естествознания и техники. Изд. ННГУ, Н. Новгород, части 1, 2, 3, издания 1994, 1996 и 1997 гг. (<http://www.unn.ru/tudm/prepod/neimark.htm>).
5. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическое моделирование в биофизике. М.: Наука, 1975. 344 с.
6. Абрамова Е.П., Рязанова Т.В. Динамические режимы стохастической модели «хищник–жертва» с учетом конкуренции и насыщения. Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11. № 3. С. 515–531.
7. Пахт Е.В., Абакумов А.И. Неопределенность при моделировании экосистемы озера. Математическая биология и биоинформатика. 2011. Т. 6. №. 1. С. 102–114. doi: 10.17537/2011.6.102.
8. Ху С., У.Ю., Лу Л. Постоянство и глобальная привлекательность в дискретной модели хищник-жертва Лотки-Вольтерры с задержками. Успехи в разностных уравнениях. 2014. Т. 1. С. 1–5.
9. Фрисман Е.Я., Кулаков М.П., Ревуцкая О.Л., Жданова О.Л., Неверова Г.П. Основные направления и обзор современного состояния исследований динамики структурированных и взаимодействующих популяций Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11. № 1. С. 119–151.
10. Чжао Дж., Ян Ю. Анализ стабильности и бифуркации дискретной системы хищник-жертва с модифицированной функциональной реакцией Холлинга-Таннера. Успехи в разностных уравнениях. 2018. Статья № 402. doi: 10.1186/s13662-018-1819-0.
11. Ху З., Тенг З., Жанг Л. Стабильность и бифуркационный анализ дискретной модели хищник-жертва с немонотонной функциональной реакцией. Нелинейный анализ: приложения в реальном мире. 2011. Т. 12. № 4. С. 2356–2377.
12. Хуанг Т., Жанг Х. Бифуркация, хаос и формирование паттернов в пространственно-временнo-дискретной системе хищник-жертва. Хаос, солитоны и фракталы. 2016. Т. 91. С. 92–107.
13. Умаров Н.Н., Шукуров Т., Юсупов И.Х., Марупов Р. Исследования влияния дозы радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника (*Melilotus officinalis* L.) методом ИК- и ЭПР- спектроскопии // Учёные записки ХГУ. 2016. №4 (39). С.52–60.
14. Юсупов И.Х., Умаров Н.Н., Марупов Р. ЭПР-спектроскопических свойств листьев репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) в зависимости от радиационного фона местности // Доклады АН Республики Таджикистан. 2015. Т. 58. № 9. С. 813–818.
15. Умаров Н.Н., [Абдуманонов А.], Тошходжаев Х.А., Абдуллаев С.Ф. Влияния радиации на прочность стебля тростника. Вестник ТНУ. Серия естественных наук. Душанбе. 2022. №1. С. 131-140.
16. Юсупов И.Х., Бахдавлатов А.Д, Алидодов Т., и др. Исследование молекулярной структуры растения донник лекарственный (*Melilotus officinalis*L.) методом спиновых меток // Доклады АН Республики Таджикистан. 2015. Т. 58. №4. С. 309–315.
17. Тейлор П. Дж. Согласованное масштабирование и выбор параметров для линейной и обобщенной моделей Лотки—Вольтерра, используемых в экологии сообществ // J. Theoret. биол, 1988. Т. 135. №. 4. С. 543–569.
18. Берков Н.А., Елисеева Н.Н. Математический практикум с применением пакета Mathcad. М: МГИУ, 2006. 135 с.

REFERENCES

1. Riznichenko G. Yu. Mathematical models in biophysics and ecology. Moscow-Izhevsk: Institute for Computer Research, 2003. 184 p.
2. Nedorezov L.V., Nazarov I.N. Continuous-discrete models of the dynamics of an isolated population and two competing species. Mathematical structures and modeling. Omsk: Omsk State. un-t.1998. Issue. 2. P. 77–91.
3. Beretta E., Capasso V., Rinaldi F. Global stability results for a generalized Lotka—Volterra system with distributed delays // J. Math. Biol. 1988. V. 26. №6. P. 661–688.
4. Neimark Yu.I. Mathematical models of natural science and technology. Ed. UNN, Nizhny Novgorod, parts 1, 2, 3, editions of 1994, 1996 and 1997. (<http://www.unn.ru/tudm/prepod/neimark.htm>).

5. Romanovsky Yu.M., Stepanova N.V., Chernavsky D.S. Mathematical modeling in biophysics. M.: Nauka, 1975. 344 p.
6. Abramova E.P., Ryazanova T.V. Dynamic regimes of the stochastic predator-prey model taking into account competition and saturation. Computer research and modeling. 2019. V. 11. No. 3. S. 515–531.
7. Pakht E.V., Abakumov A.I. Uncertainty in Lake Ecosystem Modeling. Mathematical biology and bioinformatics. 2011. Vol. 6. No. 1. S. 102–114. doi: 10.17537/2011.6.102.
8. Xu C., Wu Y., Lu L. Permanence and global attractivity in a discrete Lotka-Volterra predator-prey model with delays. Advances in Difference Equations. 2014. V.1. P.1–5.
9. Frisman E.Ya., Kulakov M.P., Revutskaya O.L., Zhdanova O.L., Neverova G.P. The main directions and review of the current state of research on the dynamics of structured and interacting populations Computer research and modeling. 2019. V. 11. No. 1. S. 119–151.
10. Zhao J., Yan Y. Stability and bifurcation analysis of a discrete predator–prey system with modified Holling–Tanner functional response. Advances in Difference Equations. 2018. Article No. 402. doi: 10.1186/s13662-018-1819-0.
11. Hu Z., Teng Z., Zhang L. Stability and bifurcation analysis of a discrete predator–prey model with nonmonotonic functional response. Nonlinear Analysis: Real World Applications. 2011. V. 12. № 4. P. 2356–2377.
12. Huang T., Zhang H. Bifurcation, chaos and pattern formation in a space-and time-discrete predator–prey system. Chaos, Solitons & Fractals. 2016. V. 91. P. 92–107.
13. Umarov N.N., Shukurov T., Yusupov I.Kh., Marupov R. Investigation of the influence of background radiation dose on the spectral characteristics of the medicinal sweet clover (*Melilotus officinalis* L.) by IR and EPR spectroscopy // Uchenye zapiski KhSU. 2016. №. 4 (39). P.52–60.
14. Yusupov I.Kh., Umarov N.N., Marupov R. EPR spectroscopic properties of burdock leaves (*Arctium tomentosum* Mill.) depending on the radiation background of the area // Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan. 2015. V. 58. №. 9. P. 813–818.
15. Umarov N.N., [Abdumanonov A.], Toshkhodzhaev Kh.A., Abdullaev S.F. Influence of radiation on the strength of the reed stem. Bulletin of TNU. Natural Sciences Series. Dushanbe. 2022. №1. P. 131-140.
16. Yusupov I.Kh., Bakhdavlatov A.D., Alidodov T., et al. Study of the molecular structure of the sweet clover (*Melilotus officinalis* L.) plant using the spin label method // Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan. 2015. V. 58. No. 4. P. 309–315.
17. Taylor P.J. Consistent scaling and parameter choice for linear and generalized Lotka—Volterramodels used in community ecology // J. Theoret. Biol, 1988. V. 135. №. 4. P. 543–569.
18. Berkov N.A., Eliseeva N.N. Mathematical workshop using the Mathcad package. M: MGIU, 2006. 135 p.