

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ У МОДЕЛЮВАННІ БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ НА ПРИКЛАДІ ЛІСОВОЇ ЕКОСИСТЕМИ

Г.М. Чоботко, Л.А. Райчук

Інститут агроекології і природокористування НААН

Наведено результати одного з найефективніших способів вивчення та прогнозування наслідків радіаційного забруднення територій, який полягає у застосуванні математичного моделювання процесів міграції радіонуклідів у радіаційно критичних екосистемах. Розглянуто теоретичний розрахунковий спосіб ідентифікації невідомих числових значень параметрів моделей міграції елементів у біологічних системах на прикладі лісової екосистеми. Доведено, що процес накопичення радіонуклідів біологічними системами відбувається набагато швидше, ніж їх виведення.

Ключові слова: радіоекологія, моделі міграції радіонуклідів, лісові екосистеми, невідомі параметри.

Аварія на Чорнобильській АЕС стала значним поштовхом у розвитку радіоекології як одного з найважливіших напрямів наукового підходу в дослідженні міграції радіонуклідів у екосистемах. Розгашування Чорнобильської АЕС у зоні лісів та складна динаміка аварійного викиду радіонуклідів, їх атмосферного перенесення на значні відстані зумовили радіаційне забруднення значних площ сільськогосподарських угідь та населених пунктів Українського Полісся. Це, насамперед, природні кормові угіддя — випаси і сіножаті, а також лісові екосистеми, які здатні формувати значні дозові навантаження (50–90%) на населення внаслідок споживання ним забруднених радіонуклідами продуктів харчування лісового походження [1, 2]. Тому такі екосистеми, як природні кормові угіддя (урочища) та лісові екосистеми, можна вважати потенційно критичними.

Один з найефективніших способів вивчення та прогнозування наслідків радіаційного забруднення територій полягає у застосуванні математичного моделювання процесів міграції радіонуклідів у радіаційно критичних екосистемах. Процес накопичення радіонуклідів біологічними системами протікає набагато швидше, ніж їх виведення, тому що радіонукліди включаються в біологічний цикл і залишаються

джерелом забруднення ще багато десятиліть поспіль. Зауважимо, що саме лісові екосистеми з-поміж усіх інших наземних екосистем можуть найдовше та у найбільших кількостях депонувати радіонукліди [3–8].

У більшості існуючих моделей міграції елементів у біологічних системах, у т.ч. лісових екосистемах (табл.), використовують коефіцієнти зміни концентрації елементів для кожного компонента створеної моделі, які характеризують швидкості і кількості переходу досліджуваного забруднювача між усіма врахованими блоками останньої.

Кількість блоків (компартментів) залежить від мети кожного окремого дослідження. Чим вищою має бути точність результатів і чим більшою складність власне модельованої екосистеми, тим більше компартментів міститиме модель. Лісові екосистеми є одними з найскладніших наземних екосистем, тому і постає питання про доповнення компартментних систем новими об'єктами. Не всі компартменти лісу у відомих дослідженнях вивчено достатньою мірою, і труднощі їх дослідження зумовлено браком знань про причини та швидкості зміни концентрації радіонуклідів у кожному з них [11–15]. Поряд із тим виникає нова проблема — невідомі коефіцієнти, які характеризують швидкості зміни концентрацій радіонуклідів у новоствореній системі.

Математичні моделі міграції радіонуклідів у лісових екосистемах [9, 10]

| № пор. | Назва моделі | Автори | Установа (організація)-розробник | Країна |
|--------|--------------|--------------------------|---|---------------------|
| 1 | FORESTLAND | Р. Авіла | Державна адміністрація радіаційного захисту (SSI) | Швеція |
| 2 | FORESTLAND | С. Фесенко, Н. Санжарова | Всеросійський НДІ сільгосп-радіології і агроєкології (RIARAE) | Російська Федерація |
| 3 | FOA | Р. Бергман | Агенція з радіаційного захисту (NDRE) | Швеція |
| 4 | RODOS | РП. Калмон | Інститут ядерної і радіаційної безпеки (IRSN) | Франція |
| 5 | FORESTLIFE | А. Дворник, Т. Жученко | Фонд інформатизації Республіки Білорусь (BFI) | Республіка Білорусь |
| 6 | FORM | М. Фріссел | Міжнародне агентство з атомної енергетики (IAEA) | Нідерланди |
| 7 | FORESTPATH | І. Лінков | Гарвардський університет | США |
| 8 | ECORAD | С. Мамікін | Московський державний університет ім. М.В. Ломоносова (MSU) | Російська Федерація |
| 9 | FINNFOOD | А. Рантаваара | Центр радіаційної безпеки Фінляндії (STUK) | Фінляндія |
| 10 | LOGNAT | М. Сімон | Університет Трієсту (UNITS) | Італія |
| 11 | RIFE | Г. Шоу | Королівський коледж | Великобританія |
| 12 | ЕКОМОДЕЛЬ | І.І. Ясковець | Інститут агроєкології і природокористування НААН | Україна |

Метою нашої роботи було визначення теоретичними розрахунковими способами параметрів математичної моделі міграції радіонуклідів у лісовій екосистемі, числові значення яких є невідомими, а експериментальне вимірювання — ускладнене.

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Дослідження багаторічної динаміки питомої активності ^{137}Cs у компонентах лісових екосистем [16] та розроблення базової математичної моделі міграції радіонукліда компартаментами екосистеми проводили за результатами вимірювань забруднення ^{137}Cs лісового масиву поблизу с. Рудня-Повчанська Лугинського р-ну Житомирської обл. Тип ґрунту на ділянці — дерново-середньопідзолистий супіщаний. Тип лісорослинних умов — В2 (свіжий субір). Товщина лісової підстилки становить 10–15 см.

Модель лісової екосистеми наведено у вигляді системи диференційних рівнянь першого порядку з початковими умовами та обмеженнями на параметри. Алгоритм реалізовано за допомогою комплексу програм, основними з яких є: підпрограма, що реалізує метод розв'язання системи диференціальних рівнянь за Рунге — Куттом; підпрограма безумовної мінімізації; підпрограма використання штрафних функцій за перевищення допустимих меж та головної програми, яка реалізує ітераційний процес оптимізації.

РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ
ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Ідея запропонованого методу полягає, насамперед, у створенні ідейно спорідненої з наведеними вище (табл.) системами базової моделі лісової екосистеми (рис. 1).



Рис. 1. Графічна формалізація компартментної моделі лісової екосистеми

Модель представлено системою диференційних рівнянь першого порядку з початковими умовами та обмеженнями на параметри (1):

$$\frac{dC_1(t)}{dt} = f_1 C_0 + \lambda_{41} C_4(t) - (\lambda_{13} + \lambda) C_1(t) \quad (1)$$

$$\frac{dC_2(t)}{dt} = f_2 C_0 + \lambda_{42} C_4(t) - (\lambda_{23} + \lambda) C_2(t)$$

$$\frac{dC_3(t)}{dt} = f_3 C_0 + \lambda_{13} C_1(t) + \lambda_{23} C_2(t) - (\lambda_{34} + \lambda) C_3(t)$$

$$\frac{dC_4(t)}{dt} = \lambda_{34} C_3(t) + \lambda_{54} C_5(t) - (\lambda_{45} + \lambda_{46} + \lambda) C_4(t)$$

$$\frac{dC_5(t)}{dt} = \lambda_{45} C_4(t) - (\lambda_{54} + \lambda_{56} + \lambda) C_5(t)$$

$$\frac{dC_6(t)}{dt} = \lambda_{46} C_4(t) + \lambda_{56} C_5(t) - \lambda C_6(t).$$

Початкові умови та обмеження мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} C_i(t_0) &= C_{i0} \\ C_i(t) &\geq 0, C_{i0} \geq 0, \lambda_{ij} \geq 0, \\ i &= 1, \dots, 6, j = 1, \dots, 6, \end{aligned} \quad (2)$$

де $C_i(t)$ – концентрація радіонукліда у i -му компартменті, λ_{ij} – константи швидкості переходу радіонукліда з i -го в j -й компартмент, C_0 – початкова концентрація радіонукліда на момент забруднення, λ – період напіврозпаду радіонукліда.

Коли розробляються концептуальні та математичні моделі таких комплексних систем, то завжди є ризик, що важливі складові або їх взаємодії можуть бути пропущені або недооцінені. Ризик можна мінімізувати, якщо використати системний підхід на основі «інтерактивної матриці» [12]. У такій матриці компартменти системи, що її утворюють, розміщуються на головній діагоналі, а взаємодії між ними описуються недиагональними елементами. Запропонована модель має цілком визначені характеристики, які і обумовлюють кількість компартментів: тип лісорослинних умов, вік і склад насадження, тип ґрунту тощо. У разі зміни однієї з характеристик змінюються і значення констант швидкостей переходу і/чи концентрації радіонукліда

в компартменті C_i . Для їх визначення слід розв'язати задачу на з'ясування оптимальних параметрів, які зможуть забезпечити мінімальне значення неузгодженості між експериментальними та розрахунковими значеннями.

Задача з визначення оптимальних значень невідомих коефіцієнтів λ_{ij} , які задовольнятимуть систему рівнянь (1) та умови і обмеження (2), а також забезпечуватимуть мінімальне значення функціоналу (3), неузгодженого між модельними та експериментальними даними (за ідеальних умов має набувати нульового значення), має такий вигляд:

$$J(\lambda_{ij}) = \frac{1}{m} \sum_1^m \frac{1}{n} \sum_1^n (C_i^e(t_k) - C_i^m(t_k))^2, \quad (3)$$

$$i = 1, \dots, n, k = 1, \dots, m,$$

де n – кількість компартментів, m – кількість експериментальних вимірювань, i – індекс, що вказує на експериментальні дані, $1/m$ – індекс, що вказує на теоретичні розрахунки.

Практично задача може бути розв'язана лише чисельно. Ідея алгоритму розв'язання задачі (1–3) полягає в тому, щоб звести її на умовний екстремум до задачі безумовної мінімізації, яка може бути розв'язана чисельно з використанням одного із методів мінімізації функції багатьох змінних, якими наразі будуть λ_{ij} , де $i, j = 1, \dots, m + l$. Значення λ_{ij} базової моделі приймаються за початкові в ітераційному процесі пошуку оптимальних параметрів розширеної моделі. Значення l дорівнює кількості доданих компартментів. Алгоритм реалізовано за допомогою комплексу програм, основними з яких є: підпрограма, яка реалізує розв'язання системи диференціальних рівнянь методом Рунге–Кутта (1, 2); підпрограма безумовної мінімізації (3); підпрограма використання штрафних функцій за перевищення допустимих меж (2) та головної програми, яка реалізує ітераційний процес оптимізації.

За результатами прогнозного моделювання найбільш забрудненою частиною лісової системи є органічний шар, що збігається з результатами більшості існуючих

моделей (табл.). Якісний аналіз цього компартмента на основі даних польових та лабораторних досліджень дає всі підстави для ствердження, що гриби та мікроорганізми відіграють основну роль у накопиченні та утриманні радіонуклідів у цьому шарі. Фізико-хімічні механізми такого процесу і досі вивчаються. Для отримання кількісного опису міграції ^{137}Cs у детальному дослідженні третього компартмента доцільно виділити гриби та міцелій у окремий компартмент, а третій компартмент розглядати як два (3 – органічний шар та 7 – гриби). Відтак, математична частина моделі доповнюється ще одним рівнянням:

$$\frac{dC_7(t)}{dt} = \lambda_{37}C_3(t) - (\lambda_{73} + \lambda_{7out} + \lambda)C_7(t) \quad (4)$$

та, відповідно, невідомими коефіцієнтами швидкості накопичення і виведення ^{137}Cs з нового, сьомого компартмента (λ_{37} , λ_{73} , λ_{7out}), а рівняння для $C_3(t)$ у системі (1) набуває такого вигляду:

$$\frac{dC_3(t)}{dt} = f_3C_0 + \lambda_{13}C_1(t) + \lambda_{23}C_2(t) + \lambda_{73}C_7 - (\lambda_{34} + \lambda_{37} + \lambda_{7out} + \lambda)C_3(t). \quad (5)$$

На основі експериментальних даних про динаміку забруднення грибів розв'язують задачу мінімізації неузгодженості між модельними та експериментальними даними, що дає змогу визначити оптимальні коефіцієнти швидкості зміни концентрації ^{137}Cs у компартментах 3 та 7. Якщо ці коефіцієнти лише частково забезпечать значення неузгодженості (4), і ця неузгодженість буде стійкою до зміни ділянок дослідження, тоді можна вважати, що такі оптимальні параметри і є шуканими коефіцієнтами. Детально методику пошуку невідомих коефіцієнтів швидкостей зміни концентрацій у компартментних моделях викладено в роботі низки науковців [17]. Результати розрахунків за розширеною моделлю наведено на рис. 2.

Динаміка концентрації ^{137}Cs у компартментах лісової екосистеми (рис. 2) збігається з результатами більшості існуючих

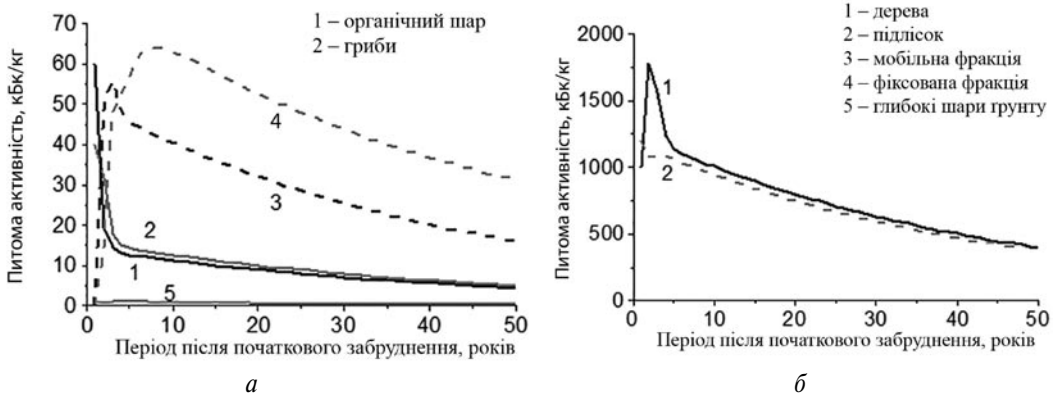


Рис. 2. Динаміка забруднення ¹³⁷Cs компартментів лісової екосистеми: *a* — компартменти 3, 7; *б* — компартменти 1, 2, 4–6

моделей (табл.). Це є свідченням відповідності методики визначення невідомих параметрів у побудові компартментних моделей [17] та доцільності її використання у разі розширення розмірності системи (1, 2) для детальнішого прогнозування поведінки радіонуклідів у екосистемах.

Отже, запропонований спосіб визначення невідомих параметрів є дієздатним, його ефективність — обернено пропорційна до кількості параметрів і залежить від адекватності заміни відображення біологічної моделі математичною. Чим правильніше вибрано найважливіші біологічні процеси і зв'язки між ними, тим точнішими будуть прогнози математичної моделі. Цей метод доволі добре себе зарекомендував за моделювання міграції радіонуклідів у органах тварин [10]. Також ним можна користуватися для визначення накопичення лікарських препаратів різними органами живих організмів [2]. Основна перевага цього методу полягає в математичному розв'язанні проблеми браку параметрів, а успіх виконання цього завдання залежить від правильності його постановки, розмірності системи, кількості невідомих

параметрів та точності представлених експериментальних даних.

ВИСНОВКИ

Компартментний спосіб моделювання обігу елементів у біологічних системах є найбільш простим та доцільним з погляду математики, оскільки прогнозування за цими моделями зводиться до розв'язання системи звичайних диференціальних рівнянь із постійними коефіцієнтами. Основна перевага цього методу полягає в математичному розв'язанні проблеми нестачі параметрів, а успіх виконання залежить від правильності постановки завдання, розмірності системи, кількості невідомих параметрів та точності представлених експериментальних даних.

Чисельних способів їх розв'язування на сьогодні існує доволі багато. Запропонований нами — зручний і з погляду узгодження біологічних процесів та взаємозв'язків між ними з формальними представленнями цих процесів у математичних співвідношеннях. Основним недоліком цих моделей є значна кількість невідомих параметрів, які характеризують швидкість процесів, що відбуваються в компартментах.

ЛІТЕРАТУРА

1. Балансовий підхід до радіогеохімічних досліджень автореабілітаційних процесів у лісових екосистемах / [О.О. Орлов, С.П. Ірклієнко,

В.В. Долін та ін.] // Проблеми екології лісів і лісочористування на Поліссі України. — 2001. — Вип. 2 (8). — С. 10–25.

2. Лес, человек, Чернобыль: Науч. тр. Междунар. семинара по современным проблемам лесной радиэкологии. — Гомель, 2000. — 151 с.
3. Особливості радіоактивного забруднення лісових екосистем Українського Полісся та прогностичне моделювання міграції ¹³⁷Cs / [Г.М. Чоботко, Л.А. Райчук, Ю.М. Пісковий, І.І. Ясковець] // Агроекологічний журнал. — 2011. — С. 230–233. — (Спецвипуск).
4. Особливості радіоактивного забруднення лісових екосистем Українського Полісся та прогностичне моделювання міграції ¹³⁷Cs / [Г.М. Чоботко, Л.А. Райчук, В.П. Ландін, Ю.М. Пісковий] // Агроекологічний журнал. — 2011. — № 1. — С. 37–42.
5. Handbook of parameter values for the prediction of radionuclide transfer in terrestrial and freshwater environments Technical reports series No. 472. — Vienna: IAEA, 2010. — 194 p. [Електронний ресурс]. — Режим доступу: http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/trs472_web.pdf
6. Райчук Л.А. Роль лісових екосистем у формуванні доз опромінення населення Українського Полісся: автореф. дис. ... канд. с.-г. наук: 03.00.16 / Л.А. Райчук. — К., 2012. — 20 с.
7. Контрмеры в сельском и лесном хозяйстве, водоохраные контрмеры / [Б.С. Пристер, В.А. Кашпаров, Л.В. Перепелятничова и др.] // 15 лет Чернобыльской катастрофы. Опыт преодоления: Национальный доклад Украины. — К., 2001. — С. 55–74.
8. Двадцять п'ять років Чернобыльської катастрофи: Безпека майбутнього: Національна доповідь України. — К.: КІМ, 2011. — 346 с.
9. Review of Forest Models Developed after the Chernobyl NPP Accident / [T. K. Riesen, R. Avila, L. Moberg, L. Hubbard] // Contaminated Forests Part of the NATO Science Series book series. — 1999. — Issue 2, Vol. 58. — P. 151–160.
10. Goor F. Quantitative comparison of models of ¹³⁷Cs cycling in forest ecosystems / F. Goor, R. Avila // Environmental Modelling & Software. — 2003. — Vol. 18. — P. 273–279.
11. Modelling radiocaesium bioavailability in forest soils / [A.V. Konoplev, I. Nikolova, R. Avila et al.] // Contaminated Forests. Ed. by Igor Linkov and William R.Schell // Nato Science Series 2. Environmental Security. — 1999. — Vol. 58. — P. 249–237.
12. Model-directed sampling in Chernobyl forests: general methodology and 1994 sampling program / [W.R. Schell, I. Linkov, V. Remkevich et al.] // The Science of the Total Environment. — 1996. — No. 180. — P. 119–240.
13. Rescigno A. Compartments / A. Rescigno, I.S. Beck; [Ed. by R.Rosen] // Foundations of Mathematical Biology. — N.Y.: Academic Press. — 1972. — P. 255–321.
14. Modelling the migration and accumulation of radionuclides in forest ecosystems: Final report on the BIOMASS Forest Working Group activities 1998–2000. — Vienna: IAEA, 2000. — 64 p.
15. Frissel M. Cycling of Mineral Nutrients in Agricultural Ecosystems / M. Frissel. — USA; Elsevier, 1978. — 364 p.
16. Радіоекологічна ситуація на території Житомирського Полісся / [В.В. Москалець, Л.А. Прокопенко, Є.Є. Перетятко та ін.] // Агроекологічний журнал. — 2007. — № 1. — С. 55–62.
17. Прокопенко Л.А. До проблеми визначення коефіцієнтів метаболізму в компартментах моделі міграції поллютантів харчовими ланцюгами / Л.А. Прокопенко, І.І. Ясковець // Агроекологічний журнал. — 2001. — № 1. — С. 31–35.

REFERENCES

1. Orlov, O.O., Irkliienko, S.P., Dolin V.V. et al. (2001). Balansovyi pidkhid do radioheokhimichnykh doslidzhen avtoreabilitatsiinykh protsesiv u lisovykh ekosystemakh [Balanced approach to radio geochemical studies of autorealibration processes in forest ecosystems]. *Problemy ekolohii lisiv i lisokorystuvannia na Polissi Ukrainy — Problems of forest ecology and forest use in the Polissya of Ukraine*, 2 (8), 10–25 [in Ukrainian].
2. *Les, chelovek, Chernobyl [Forest, man, Chernobyl]*. (2000). Gomel [in Russian].
3. Chobotko, H.M., Raichuk, L.A., Piskovyi, Iu.M., & Yaskovets, I.I. (2011). Osoblyvosti radioaktyvnoho zabrudnennia lisovykh ekosystem Ukrainskoho Polissia ta prohnostychno modeliuвання mihratsii ¹³⁷Cs [Features of Radioactive Contamination of Ukrainian Polissya Forest Ecosystems and predictive ¹³⁷Cs modeling migration]. *Ahroekolohichnyi zhurnal — Agroecological Journal, Special Edition*, 230–233 [in Ukrainian].
4. Chobotko, H.M., Raichuk, L.A., Landin, V.P., & Piskovyi, Iu.M. (2011). Osoblyvosti radioaktyvnoho zabrudnennia lisovykh ekosystem Ukrainskoho Polissia ta prohnostychno modeliuвання mihratsii ¹³⁷Cs [Features of Radioactive Contamination of Ukrainian Polissya Forest Ecosystems and predictive ¹³⁷Cs modeling migration]. *Ahroekolohichnyi zhurnal — Agroecological Journal*, 1, 37–42 [in Ukrainian].
5. Handbook of parameter values for the prediction of radionuclide transfer in terrestrial and freshwater environments. Technical reports series, No. 472. — Vienna: IAEA. [pub.iaea.org](http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/trs472_web.pdf). Retrieved from http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/trs472_web.pdf [in English].
6. Raichuk, L.A. (2012). Rol lisovykh ekosystem u formuvanni doz oprominennia naseleння Ukrainskoho Polissia [The role of forest ecosystems in forming of doses of Ukrainian Polissya population exposure doses]. *Extended abstract of candidate's thesis*. Kyiv [in Ukrainian].
7. Pryster, B.S., Kashparov, V.A. Perepeliatnykova, L.V. et al. (2001). Kontmery v selskom y lesnom khoziaistve, vodookhranye kontmery [Counter-

- measures in agriculture and forestry, water security countermeasures]. *15 years of the Chernobyl disaster. Experience of overcoming: National report of Ukraine*. Kiev [in Russian].
8. *Dvadtsiat piat rokov Chornobylskoi katastrofy: Bezpeka maibutnoho: Natsionalna dopovid Ukrainy [Twenty-five years of the Chernobyl disaster: Safety of the Future: National Report of Ukraine]*. (2011). Kyiv: KIM [in Ukrainian].
 9. Riesen, T. K., Avila, R., Moberg, L., & Hubbard, L. (1999). Review of Forest Models Developed after the Chernobyl NPP Accident. *Contaminated Forests Part of the NATO Science Series book series, 2, 58, 151–160* [in English].
 10. Goor F., & Avila, R. (2003). Quantitative comparison of models of ¹³⁷Cs cycling in forest ecosystems. *Environmental Modelling & Software, 18, 273–279* [in English].
 11. Konoplev, A.V., Nikolova, I., Avila R. et. al. (1999). Modelling radiocaesium bioavailability in forest soils. *Contaminated Forests*. Igor Linkov, William R. Schell (Eds.); *Nato Science Series 2, Environmental Securit, 58, 249–237* [in English].
 12. Schell, W.R., Linkov, I., Remkevich, V., Chistic, O., Lutsko, A., Dvornik, A.M., at al. (1996). Model-directed sampling in Chernobyl forests: general methodology and 1994 sampling program. *The Science of the Total Environmental, 180, 119–240* [in English].
 13. Rescigno, A. & Beck, I.S. (1972). Compartments. *Foundations of Mathematical Biology*. R. Rosen (Ed.). N.Y.: Academic Press [in English].
 14. *Modelling the migration and accumulation of radionuclides in forest ecosystems. Final report on the BIO-MASS Forest Working Group activities 1998–2000*. (2000). Vienna: IAEA [in English].
 15. Frissel, M. (1978). *Cycling of Mineral Nutrients in Agricultural Ecosystems*. USA: Elsevier [in English].
 16. Moskalets, V.V., Prokopenko, L.A., Peretiatko, Ie.Ie., Polinkevych, V.A., Protas, N.M., & Pulynets, A.S. (2007). Radioekolohichna sytuatsiia na terytorii Zhytomyrskoho Polissia [Radioecological situation on the territory of Zhytomyr Polissya]. *Ahroekolohichnyi zhurnal – Agroecological Journal, 1, 55–62* [in Ukrainian].
 17. Prokopenko, L.A., & Yaskovets, I.I. (2001). Do problemy vyznachennia koefitsientiv metabolizmu v kompartmentakh modeli mibratsii poliutantiv kharčovymy lantsiuhamy [To the problem of determining the coefficients of metabolism in compartments of the model of pollutants migration by food chains]. *Ahroekolohichnyi zhurnal – Agroecological Journal, 1, 31–35* [in Ukrainian].
-