

УДК 579.631.46:669.018.674:519.95

## ІНДУКТИВНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ ЧИСЕЛЬНОСТІ АМІЛОЛІТИЧНИХ МІКРООРГАНІЗМІВ НА ЗАБРУДНЕНІЙ ДІЛЯНЦІ ҐРУНТУ

Г.О. Іутинська<sup>1</sup>, О.Г. Мороз<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут мікробіології та вірусології НАН України, Київ, вул. Заболотного, 154

<sup>2</sup>Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій та систем НАН та МОН України, Київ, пр-т Академіка Глушкова, 40

*galyna.iutynska@gmail.com, olhahryhmoroz@gmail.com*

В статті представлено результати застосування комбінаторно-генетичного алгоритму КОМБІ-ГА для моделювання за дослідними даними чисельності амілолітичних мікроорганізмів на забрудненій міддю ділянці ґрунту. Побудовані математичні моделі описують зміни чисельності мікроорганізмів у залежності від деяких екологічних факторів та концентрації міді у ґрунті. Показано перспективність використання індуктивного підходу для моделювання мікробіологічних процесів у ґрунті.

*Ключові слова: комбінаторний алгоритм МГУА, генетичний алгоритм, гібридний алгоритм КОМБІ-ГА, амілолітичні мікроорганізми, ґрунт, важкі метали, індуктивне моделювання.*

The article presents the application results of the combinatorial-genetic algorithm COMBI-GA for modeling from experimental data of amyolytic microorganism quantity in a soil plot contaminated by copper. The constructed mathematical models describe changes in the quantity of amyolytic microorganisms depending on certain environmental factors and the copper concentration in the soil. The perspective of using the inductive approach to modeling of microbiological processes in soil is shown.

*Key words: combinatorial GMDH algorithm, genetic algorithm, hybrid algorithm COMBI-GA, amyolytic microorganisms, soil, heavy metals, inductive modelling.*

В статье представлены результаты применения комбинаторно-генетического алгоритма КОМБИ-ГА для моделирования по опытным данным количества амилолитических микроорганизмов на загрязненном медью участке почвы. Построенные математические модели описывают изменения численности микроорганизмов в зависимости от некоторых экологических факторов и концентрации меди в почве. Показана перспективность использования индуктивного подхода для моделирования микробиологических процессов в почве.

*Ключевые слова: комбинаторный алгоритм МГУА, генетический алгоритм, гибридный алгоритм КОМБИ-ГА, амилолитические микроорганизмы, почва, тяжелые металлы, индуктивное моделирование.*

## **Вступ**

Одним з основних компонентів більшості екосистем є ґрунт, в утворенні, еволюції та формуванні родючості якого важливу роль відіграють мікроорганізми. Антропогенне забруднення біосфери впливає на всі живі компоненти біогеоценозів, у тому числі й на ґрунтові мікроорганізми [1].

Наявність у ґрунті важких металів здебільшого має негативний вплив на ґрунтову мікробіоту, пригнічуючи розвиток мікроорганізмів і зменшуючи їх чисельність, що призводить до руйнування природних екосистем. У вирішенні проблеми боротьби із забрудненням ґрунтів мікробіологічні дослідження відіграють важливу роль на етапах довгострокових спостережень виявлення і прогнозування критичних ситуацій [2, 3].

Для вивчення мікробіоти ґрунту як складної саморегульованої біологічної системи доцільно застосовувати системний підхід, що відкриває принципову можливість для формалізації даних спостережень шляхом побудови математичних моделей. Моделювання за даними спостережень є необхідною умовою екологічного моніторингу, оскільки дозволяє оперативно оцінювати поточні екологічні ситуації та прогнозувати їх на майбутнє.

Для аналізу, моделювання і прогнозування екологічних процесів в умовах неповноти апріорної інформації про механізми модельованих явищ, доцільно застосовувати методи прямої побудови моделей за даними натурних експериментів. Одним з найбільш ефективних методів моделювання за експериментальними даними є метод групового урахування аргументів (МГУА) [4]. Це індуктивний метод для побудови моделей складних процесів за короткими вибірками даних. В його основу покладені принципи зовнішнього доповнення, автоматичної генерації та послідовної селекції ускладнюваних структур моделей [4, 5, 6].

В [7] для аналізу ґрунтової мікробіоти темно-сірого опідзоленого ґрунту (Київська обл.), забрудненого важкими металами, застосовується автоматизована системи моделювання АСТРІД [8] з різними алгоритмами МГУА, які відрізняються класами моделей чи генераторами структур.

Поєднання комбінаторного алгоритму МГУА (КОМБІ) [5] та генетичного алгоритму (ГА) у вигляді гібридного алгоритму КОМБІ-ГА [9, 10, 11] є ефективним засобом знаходження глобально-оптимального або практично придатного розв'язку задач структурно-параметричної ідентифікації, прогнозування, побудови моделей об'єктів і процесів за даними спостережень в умовах невизначеності, низького рівня апріорних знань про модельований об'єкт та великої розмірності за прийнятний час. Він поєднує в собі основні переваги та усуває недоліки цих двох алгоритмів, досягаючи синергетичного ефекту.

В цій роботі представлено результати застосування комбінаторно-генетичного алгоритму КОМБІ-ГА для моделювання на основі спостережень зміни чисельності амілолітичних мікроорганізмів у забрудненій міддю ділянці ґрунту.

## 1. Постановка задачі

Основною резервною речовиною рослин є крохмаль. Потрапляючи в ґрунт з рослинними рештками, він піддається розщепленню ферментами амілазами, які синтезуються амілолітичними мікроорганізмами. Активними продуцентами амілаз є гриби і бактерії, зокрема деякі бацили, псевдомонади і різні види стрептоміцетів. В анаеробних умовах крохмаль розщеплюють кластридії, які до того ж збагачують ґрунт азотом [12].

Дослідження амілолітичної мікробіоти ґрунту проводилося на моніторингових ділянках в дрібноділянковому польовому досліді на темно-сірому опідзоленому легкосуглинковому ґрунті Київської області. Модельне забруднення ґрунту здійснювалось шляхом щорічного внесення в ґрунт розчинів солей міді. Кількість внесеного металу (з розрахунку вмісту його іонів) відповідала дозі забруднення 2 гранично допустимих концентрацій (ГДК). Зразки ґрунту для аналізів відбирали на глибині орного шару (0 – 20 см) приблизно через 2, 30, 90 діб після внесення солей металу. Тобто здійснювали по 3 вимірювання в кожному з 4 років (з 1993 по 1996 рр.), отримавши загалом 12 точок вимірювань.

Кількість амілолітичних мікроорганізмів у контрольному і забрудненому ґрунті визначали методом посіву ґрунтової суспензії на агаризоване крохмалево-аміачне живильне середовище.

Зважаючи на відсутність інформації щодо внутрішньої структури модельованих процесів, які зумовлюють динаміку чисельності амілолітичних мікроорганізмів на забрудненій міддю ділянці ґрунту, для побудови моделей було застосовано алгоритм індуктивного моделювання КОМБІ-ГА. При цьому в якості початкових даних було сформовано такий список вхідних незалежних змінних:

$x_1$  – чисельність амілолітичних мікроорганізмів на контрольній ділянці (млн. в 1 г сухого ґрунту);

$x_2$  – концентрація міді (мг/кг ґрунту);

$x_3$  – число діб від дати забруднення;

$x_4$  – середня температура повітря поточної декади (°C);

$x_5$  – середня температура повітря попередньої декади (°C);

$x_6$  – середня вологість повітря поточної декади (%);

$x_7$  – середня вологість повітря попередньої декади (%).

Вихідною (залежною) змінною  $Y$  були дані про чисельність амілолітичних мікроорганізмів на ділянці з експериментальним модельним забрудненням ґрунту міддю.

При моделюванні чисельності мікроорганізмів у ґрунті на контрольній незабрудненій ділянці враховувалися 5 останніх змінних з  $x_3$  по  $x_7$ , а першу змінну  $x_1$  було прийнято як вихідну величину  $Y_{\text{контр}} = x_1$ .

Як видно з наведеного переліку, до змінних додатково було внесено дані вологості та температури повітря попередніх декад, що було зроблено з огляду на певну інерційність біологічних процесів.

Задачу індуктивного моделювання в даному разі коротко можна сформулювати так: задано набір даних з 12 спостережень за 7 вхідними змінними  $x_1, x_2, \dots, x_7$  і однією вихідною змінною  $y$  – кількість амілолітичних мікроорганізмів на забрудненій ділянці. Завданням МГУА є знаходження моделі  $y=f(x_1, x_2, \dots, x_7, \theta)$  з мінімальним значенням заданого критерію якості  $C(f)$ , де  $\theta$  – невідомий вектор параметрів. Оптимальна модель визначається як  $f^* = \arg \min_{\Phi} C(f)$ , де  $\Phi$  – набір моделей різної складності,  $f \in \Phi$ .

## **2. Гібридний перебірний алгоритм КОМБІ-ГА**

В цьому алгоритмі для знаходження глобально-оптимальної структури моделі використовується біологічно інспірований генетичний алгоритм (ГА) випадкового глобального пошуку [13]. Генетичний алгоритм – це один з метаевристичних алгоритмів глобальної оптимізації, сконструйований в результаті узагальнення та імітації в штучних системах таких властивостей живої природи, як природний відбір, пристосовність до змінних умов середовища, успадкування нащадками життєво необхідних властивостей від батьків і тому подібне.

Довільний генетичний алгоритм має такі характеристики:  $P_0 = (a_1^0, \dots, a_M^0)$  – початкова популяція розміру  $M$ ;  $a_i^0$  – претендент на розв'язок задачі оптимізації, представлений у вигляді хромосоми довжиною  $L$ ;  $F$  – цільова функція (ЦФ);  $G$  – множина генетичних операторів;  $s$  – правило завершення алгоритму. Хромосоми складаються з генів, які зазвичай кодуються значеннями з двійкового алфавіту  $\{0, 1\}$ .

Вхідними даними для будь-якого ГА є початкова популяція – скінченна множина хромосом  $P_0$ , кожна з яких представляє можливий варіант розв'язку задачі. Далі з батьківських хромосом в  $P_0$  за допомогою певних генетичних правил утворюється перша популяція нащадків  $P_1$ , аналогічно з популяції  $P_1$  утворюється наступна популяція  $P_2$  і так далі. Процес продовжується доти, поки не буде виконано задане правило завершення алгоритму. Важливою особливістю роботи ГА є те, що з кожним кроком певні популяційні характеристики алгоритму, зокрема, середнє значення ЦФ популяції, покращуються.

Алгоритм КОМБІ-ГА [9, 10, 11] поетапно формує множину найбільш перспективних структур частинних моделей і знаходить оптимальну з них, використовуючи генетичні оператори селекції, кросинговеру та мутації, які визначають механізм їх перебору.

Детально особливості конструювання та роботи цього алгоритму описано в [9, 10], де подаються й обговорюються результати дослідження його ефективності на тестових і реальних задачах.

### 3. Результати моделювання

Для обчислення оцінок чисельності амілолітичних мікроорганізмів на забрудненій ділянці необхідно знати або задавати чисельність амілолітичних мікроорганізмів на контрольній (незабрудненій) ділянці.

На ефективність розв'язання задач малої розмірності методами на основі МГУА суттєво впливає розбиття вибірки [4], в даному випадку з 12 точок спостережень. В цій роботі після виконання попередніх розрахунків до навчальної вибірки було обрано точки спостережень за 1995 та 1996 роки, до перевірної – за 1993 р., екзаменаційної – за 1992 р., оскільки при такому розбитті вибірки було одержано кращі моделі.

В результаті для контрольної ділянки було побудовано таку модель:

$$Y_{\text{контр.}} = 0,2136x_4 - 0,7149x_5 + 0,5412x_7. \quad (1)$$

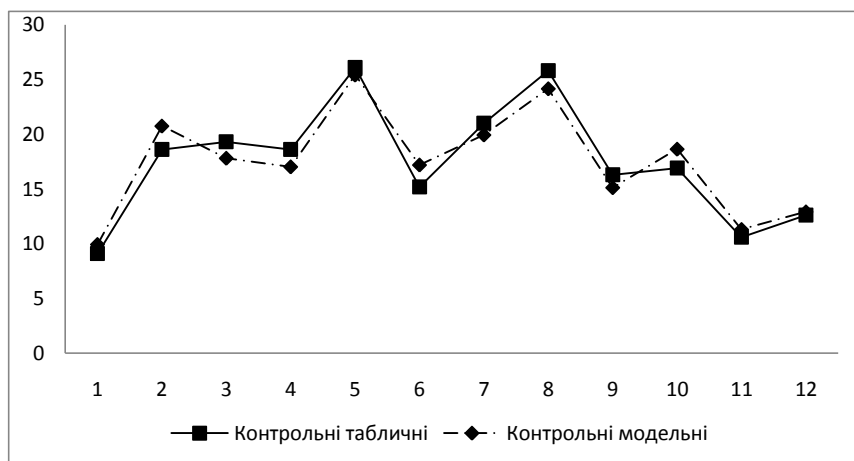


Рис. 1 Графіки зміни чисельності амілолітичних мікроорганізмів на контрольній ділянці в точках вимірювання (по три вимірювання за вегетаційний період в 1993 – 1996 рр.).

З Рис. 1 видно, що на кількість амілолітичних мікроорганізмів найбільший вплив має температура повітря попередньої та поточної декади та вологість попередньої декади. Отже, значний вплив на ці мікроорганізми мають погодні умови, що діють протягом певного часу. Середньоквадратична помилка моделі становила 0,738.

При побудові моделі для дослідної (забрудненої) ділянки було використано всі 7 вказаних вище аргументів, серед яких і зміна чисельності амілолітичних мікроорганізмів на контрольній ділянці  $x_1$ . В результаті для дослідної ділянки було побудовано таку модель:

$$Y = 0,743x_1 + 1,6516x_2 - 0,9182x_5 - 0,2845x_7. \quad (2)$$

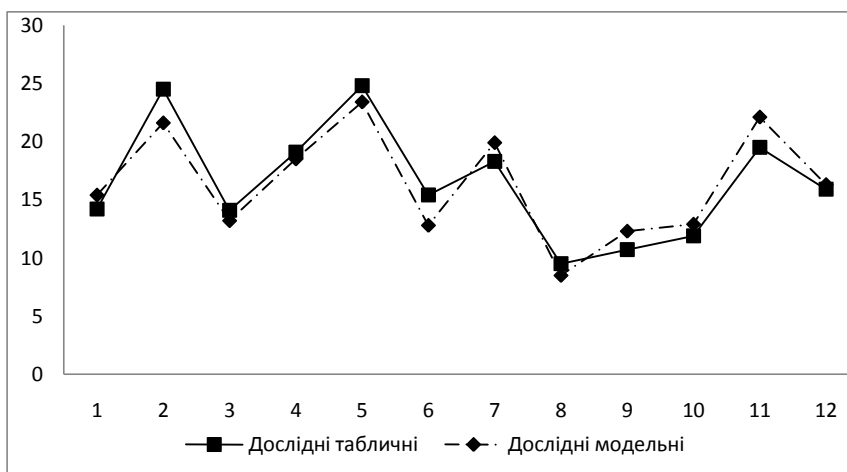


Рис. 2 Графіки зміни чисельності амілолітичних мікроорганізмів на забрудненій міддю ділянці в точках вимірювання (по три вимірювання за вегетаційний період 1993–1996 рр.)

Як видно з Рис. 2, при забрудненні ґрунту міддю на розвиток мікроорганізмів має більший вплив температура поточної декади, ніж попередньої. Середньоквадратична помилка моделі становила 0,814.

**Висновки.** Проведені дослідження продемонстрували можливість ефективного моделювання чисельності амілолітичних мікроорганізмів у ґрунті при застосуванні алгоритму КОМБІ-ГА на основі експериментальних даних. Розраховані за моделлю дані достатньою мірою збігаються з експериментальними, що дає можливість використовувати їх в системі екологічного моніторингу ґрунту для оцінки небезпечних ситуацій, відновлення даних у проміжних точках і прогнозування розвитку амілолітичних мікроорганізмів у певних екологічних умовах.

В подальших дослідженнях доцільно виконати розрахунки в класі нелінійних моделей, що дозволить підвищити точність моделювання.

## Література

1. Андреюк К.І., Іутинська Г.О., Антипчук А.Ф. та ін. Функціонування мікробних ценозів ґрунту в умовах антропогенного навантаження. – К.: Обереги, 2001. – 240 с.
2. Іутинська Г.О. Ґрунтова мікробіологія. – К.: Арістей, 2006. – 282 с.
3. Андреюк Е.И., Іутинская Г.А., Петруша З.В. Гомеостаз микробных сообществ почв, загрязненных тяжелыми металлами // Мікробіол. журнал, 1999. – № 6 (61). – С. 15 – 21.
4. Ивахненко А.Г., Степашко В.С. Помехоустойчивость моделирования. – Киев: Наук. думка, 1985. – 216 с.
5. Степашко В.С. Комбинаторный алгоритм МГУА с оптимальной схемой перебора моделей // Автоматика. – 1981. – № 3. – С. 31-36.
6. Степашко В.С. Алгоритмы МГУА как основа автоматизации процесса моделирования по экспериментальным данным. – Автоматика, 1988. – № 4. – С. 44 – 55.
7. Іутинська Г.О., Степашко В.С., Коппа Ю.В. Моделювання динаміки чисельності мікроорганізмів у ґрунті, забрудненому важкими металами // Мікробіологічний журнал. – 2002. – № 3. – С. 59 – 67.
8. Степашко В.С., Коппа Ю.В. Опыт применения системы АСТРИД для моделирования экономических процессов по статистическим данным // Кибернетика и выч. техника, 1998. – Вып.117. – С. 24-31.
9. Мороз О.Г. Переборный алгоритм МГУА с генетическим поиском оптимальной модели // УСиМ, 2016 – №6. – С. 73 – 79.
10. Moroz O., Stepashko V. Hybrid Sorting-Out Algorithm COMBI-GA with Evolutionary Growth of Model Complexity / In: Advances in Intelligent Systems and Computing II / N. Shakhovska, V. Stepashko, Editors. – AISC book series, Vol. 689. – Cham: Springer, 2017. – P. 346 – 360.
11. Moroz O. COMBI-GA algorithm as an effective technology for researching microbiological processes // Abstracts of reports of the XV-th congress of Vinogradskyi society of microbiologists of Ukraine, September 11–15, 2017, Odessa. – Lviv: SPOLOM, 2017. – P. 105.
12. Schlegel H. G. General microbiology, 7th edition. – Cambridge University Press, 1993. – 655 p.
13. Hollannd J.H. Adaptation in natural and artificial systems. An introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence / J.H. Holland. – University of Michigan, 1975. – 210 p.