

Описание языка модельных сценариев программы «Эволюционный конструктор»

Для создания модельных сценариев в рамках программного комплекса «Эволюционный конструктор» (ЭК) был разработан и реализован язык спецификаций моделей и интерпретатор этого языка. Сценарий в ЭК состоит из двух блоков – блока задания параметров (*декларации* модели) и *расчётно*го блока, причём первый блок всегда предшествует второму. Также в сценарии могут быть блоки комментариев, состоящие из строк, начинающихся с символов: %, // и ! (восклицательный знак). Язык сценариев нечувствителен к регистру используемых букв.

Блок задания параметров начинается с команды `declare` и заканчивается командой `end declare`. Ниже в таблице приведены команды, задающие различные параметры модели в блоке декларации (в скобках указаны синонимы команды, если они есть):

Таблица ПП.1

Перечень команд блока декларации модели

Команда	Описание	Пример
<code>volume</code>	Задаёт объём окружающей среды	<code>volume = 1e-1</code>
<code>flow</code>	Задаёт интенсивность протока в среде (аргумент принимает значения от 0 до 1)	<code>flow = 0.1</code>
<code>nonspec (ns)</code>	Задаёт количество неспецифических субстратов в системе	<code>nonspec = 2</code>
<code>spec (ss)</code>	Задаёт количество специфических субстратов в системе	<code>spec = 3</code>
<code>init_ns (substrates_ns)</code>	Задаёт концентрации неспецифических субстратов в среде в начальный момент времени (список)	<code>init_ns = 1.5e-3, 2e-3</code>
<code>init_ss (substrates_ss)</code>	Задаёт концентрации специфических субстратов в среде в начальный момент времени (список)	<code>init_ss = 0.1, 0.2, 0.3</code>

<code>inflow_ns</code> (<code>comsub</code>)	Задаёт концентрацию неспецифических субстратов в притоке (список пар <i>номер субстрата</i> : <i>концентрация субстрата</i>)	<code>inflow_ss = 1:0.1,</code> <code>4:0.2</code>
<code>mut_probability</code> (<code>mut_prob</code>)	Задаёт вероятность мутации	<code>mut_prob = 1e-8</code>
<code>hgt_probability</code> (<code>hgt_prob</code>)	Задаёт вероятность горизонтального переноса генетического материала	<code>hgt_prob = 1e-10</code>
<code>population</code> (<code>pop, p</code>)	Открывает блок декларации популяции (см. табл. П1.2)	<code>pop = 1</code>
<code>end population</code> (<code>end pop, end p</code>)	Закрывает блок декларации популяции (параметр необязателен)	<code>end pop</code>

Каждая популяция в блоке декларации описывается отдельным вложенным блоком, который открывается командой `population (pop, p)` и закрывается командой `end_population (end pop, end p)`. Параметром команды `pop` является номер популяции. Команды, определяющие параметры популяции, перечислены в табл. П1.2:

Таблица П1.2

Перечень команд блока описания популяции

Команда	Описание	Пример
<code>size</code>	Задаёт начальный размер популяции	<code>size = 4e+8</code>
<code>increaser</code> (<code>strategy,</code> <code>trophic</code>)	Задаёт трофическую стратегию популяции (аргумент – название стратегии, например, <code>rubel</code> , <code>liebig</code> , <code>inhibitory</code> , <code>chaotic</code> и т.д.)	<code>increaser = rubel</code>
<code>k_death</code>	Задаёт параметр смертности	<code>k_death = 1e-30</code>
<code>k_flow</code>	Задаёт параметр протока	<code>k_flow = 0.05</code>

cprod	Задаёт норму синтеза специфических продуктов	cprod = 1e+5
ccons_nsp (ccons_ns)	Задаёт норму утилизации неспецифических субстратов	ccons_nsp = 1e+7
ccons_sp (ccons_ss)	Задаёт норму утилизации специфических субстратов	ccons_sp = 1e+5
genes_n	Добавляет в геном популяции ген утилизации неспецифического субстрата. Список аргументов: <i>номер субстрата : список значений признака (аллелей) : список долей аллелей в популяции</i>	genes_n = 1; allele_values:3,5,6; allele_concentrations: 0.1,0.6,0.3
genes_s	Добавляет в геном популяции ген утилизации специфического субстрата. Список аргументов: <i>номер субстрата : список значений признака (аллелей) : список долей аллелей в популяции</i>	genes_s = 2; allele_values:3,5,6; allele_concentrations: 0.1,0.6,0.3
genes_p	Добавляет в геном популяции ген синтеза специфического продукта. Список аргументов: <i>номер субстрата : список значений признака (аллелей) : список долей аллелей в популяции</i>	genes_p = 3; allele_values:3,5,6; allele_concentrations: 0.1,0.6,0.3

Значения признаков r_i , c_i , (см. раздел 2.1.2) определяются как частное соответствующих параметров – фиксированной части – *нормы утилизации* (ccons_ns, ccons_ss) и переменной части – значениями, заданными при аргументе allele_values в командах genes_n и genes_s. Значения признаков d_i определяются как произведения аналогичных параметров – фиксированная часть – *норма синтеза* (cprod), переменная – задаётся genes_p. Например, приведённый ниже фрагмент модели, описанный с помощью языка сценариев, описывает мономорфную (по признаку утилизации специфического субстрата №1) популяцию, где фактическое значение параметра c_1 равно $2 \cdot 10^{-5}$ (что означает, что на одно деление клетки тратится 10^5 молекул субстрата):

```

pop = 1
  ccons_sp = 1e+5
  genes_s=1;allele_values:2;allele_concentrations:1.0
  // Описание других параметров популяции
end pop

```

Расчётный блок начинается сразу после команды `end declare`. В таблице П1.3 приведены команды этого блока:

Таблица П1.3

Перечень команд блока расчёта модели

Команда	Описание	Пример
<code>iterate</code>	Рассчитать n итераций модели (n – аргумент). Стохастическая компонента отключена – во время невозможны мутации, горизонтальный перенос и т.д.)	<code>iterate = 400</code>
<code>stochastic</code> (<code>s_iterate</code>)	Рассчитать n итераций модели (n – аргумент). Стохастическая компонента включена – возможные события определяются соответствующими вероятностями	<code>stochastic = 400</code>
<code>mutation</code> (<code>mut</code>)	Произвести мутацию в одной (нескольких) клетке популяции. Детальное описание команды приведено ниже в тексте.	Описание ниже в тексте
<code>horizontal_trans</code> <code>fer</code> (<code>ht</code> , <code>hgt</code>)	Произвести горизонтальный перенос гена из клетки популяции-донора в клетку популяции-акцептора. Детальное описание команды приведено ниже в тексте.	Описание ниже в тексте
<code>set_nssc</code> (<code>set_ns</code>)	Изменить концентрацию неспецифического субстрата в притоке. Аргументы – номер	<code>set_ns=1 : 0.5</code>

	<i>субстрата : новая концентрация</i>	
set_flow (set_f)	Изменить интенсивность протока (аргумент принимает значения от 0 до 1)	set_flow = 0.2
buffer_on	Фиксировать концентрацию субстрата в среде на одном уровне (вне зависимости от действия протока, и жизнедеятельности популяций). Аргументы – <i>тип субстрата</i> (возможные значения N, S): <i>номер субстрата : концентрация</i>	buffer_on=S:1:0.7
buffer_off	Отменить действие команды buffer_on. Аргументы – <i>тип субстрата</i> (возможные значения N, S): <i>номер субстрата</i>	buffer_off=S:1
ns_pattern	Задать последовательность концентраций неспецифического субстрата в притоке, сменяющих друг друга, с указанием периода длительности для каждого значения концентрации. Аргументы – <i>номер субстрата; список значений концентраций; список длительностей периодов</i>	ns_pattern = 1; concentrations:0.1,2 ,0; durations:10,20,300

Команда mutation (mut) задаёт мутацию в одной или нескольких клетке популяции:

```
mutation= pop:1; gene_type:n; sub_num:0; from:1.0; to:7.0; count:0.01
```

где pop – номер популяции; gene_type – тип мутантного гена (возможные значения n, s, p); sub_num – номер субстрата, которому соответствует мутантный ген; from – исходное значение признака (будут мутировать клетки, обладающие именно этим признаком); to – мутантное значение признака (мутировавшие клетки будут обладать именно таким признаком); count – необязательный параметр – доля мутантов от всей

численности популяции, в случае отсутствия доля будет выбрана таким образом, чтобы мутантная субпопуляция имела минимально возможный размер (с учётом вычислительной точности).

Команда `horizontal_transfer (ht, hgt)` задаёт горизонтальный перенос гена(-ов) из клетки популяции-донора в клетку популяции-акцептора:

```
hgt=acceptor:2;      donor:1;      gene_type:n;      sub_num:1,2;
gene_type:s;        sub_num:1,3,4,...;      p_size:1e+1;
allele:greatest|lowest:1
```

где `acceptor` – номер популяции акцептора; `donor` – номер популяции-донора; `gene_type` – тип переносимых генов (возможные значения *n*, *s*, *p*); `sub_num` – номера переносимых генов; `p_size` – необязательный параметр – размер субпопуляции, «подвергнувшейся горизонтальному переносу», в случае отсутствия будет установлен минимально возможный размер (с учётом вычислительной точности); `allele` – необязательный параметр – принцип отбора аллелей в клетках популяции-донора для переноса (возможные значения *greatest*, *lowest*), определяет, будут переноситься аллели с наибольшим или наименьшим значением признака, в случае отсутствия будут выбираться аллели с наибольшей представленностью в популяции-доноре.

Примечание: за один горизонтальный перенос можно перенести гены всех типов. Для описания такой ситуации необходимо перечислить списки переносимых генов следующим образом: указать тип гена, затем список номеров генов, другой тип гена, список номеров генов и т.д. (см. пример выше).