Simulování života mikroorganismů v modelovém mikrosvětě

Filip Majer Gymnázium Jana Keplera

https://github.com/nat-int/mikrosim

dokumentace je nedokončená

Obsah

1. Úvod	2
1.1. Cíle	2
1.2. Související práce	2
2. Model	2
2.1. Prostředí	
2.2. Proteiny	3
2.2.1. Aktivní místa	4
2.2.2. Allosterická místa	5
2.2.3. Reakce	5
2.2.4. Genom	6
2.2.5. Speciální funkce	7
2.3. Buňky	8
3. Implementace	8
3.1. Použité technologie	
4. Návod k použití	
4.1. Kompilace	
4.2. Návod k aplikaci	
4.2.1. okno "Controls"	
4.2.2. okno "mikrosim"	
4.2.3. okno "effect blocks"	
4.2.4. okno "extra info"	
4.2.5. okno "cell list"	
4.2.6. okno "protein view"	
4.2.7. okno "cell view"	
4.2.8. zobrazení simulace	
5. Závěr	
6. Odkazy	15

1. Úvod

Život je plný komplexních systémů, ale pro jeho zkoumání je někdy užitečné mít zjednodušený model, který jsme schopni plně propočítat. Naše schopnosti počítání posunuly vpřed počítače, které dnes už můžeme dávat k propočítání i poměrně komplikované modely.

1.1. Cíle

Cílem tohoto projektu je vytvořit grafickou aplikaci, která zobrazuje a simuluje život modelových mikroorganismů. Model by měl být takový, aby nebyl moc daleko od středoškolského modelu, toho jak mikroorganismy fungují. Zároveň by měl být dostatečně jednoduchý, aby pomocí něj šlo najednou simulovat více variant organismů i na běžně výkonných počítačích.

1.2. Související práce

Existuje hodně modelů i jejich simulátorů zjednodušeného života. Velká část z nich funguje tak, že se nadefinuje několik typů buněk, kde má každá své specifické chování, ze kterých se poskládá organismus. Ten se pak může replikovat do stejné nebo podobné buněčné konfigurace. Jedním takovým simulátorem je Biogenesis (https://biogenesis.sourceforge.net/).

Jiná velká skupina modelů simuluje organismy jako objekty, které podle definovaných pravidel interagují s okolím a podle vstupů provádí různé akce. Vstupy typicky zpracovávají s využitím neuronových sítí. Příkladem pro tuto skupinu je The bibites (https://thebibites.itch. io/the-bibites).

Oba tyto přístupy tak modelují spíše mnohobuněčné organismy než jednobuněčné mikroorganismy.

O něco obecnější model má projekt ALIEN (https://alien-project.org/), který je založený na simulaci částic, které mohou tvořit vazby a předávat si signály. ALIEN se snaží o jednoduchý model a z něj vyvstávající chování, a tak v něm život není tak blízko realitě, jako bychom chtěli. Kromě toho je napsaný v CUDA, takže vyžaduje počítač s grafickou kartou od společnosti Nvidia.

2. Model

Model je ve dvou dimenzích, aby bylo snadnější jej implementovat a přehledně vykreslovat.

2.1. Prostředí

Mikroorganismy žijí v definovaném prostředí. Jako základ prostředí této simulace byla zvolena tekutina, protože i skutečné mikroorganismy často žijí ve vodě. Standardní způsoby simulování tekutin jsou částicové, eulerovské (kontinuální) a kombinované. V tomto prezentovaném modelu byl použit částicový model z tohoto simulátoru: https://github.com/SebLague/Fluid-Sim/tree/Episode-01, především proto, že daný model je snadno implementovatelný, zároveň je pro částicové simulace snažší zabránit tvorbě hmoty z ničeho. Do prezentovaného modelu byl převzat bez korekcí shlukování částic při rychlých ztrátách tlaku, protože chování tekutiny příliš neovlivní a jejich vynecháním se model zjednodušší. Snadnost implementace tu je na úkor realismu, tekutina je zde svými vlastnostmi mezi plynem, kapalinou a gelem. Přesto je dostatečně blízko reálné tekutině.

2.1 Model – Prostředí

Tento model ve zkratce funguje tak, že tekutinu rozdělí na částice, kde každá z nich představuje malý objem tekutiny. Částice se zrychlují takovým směrem, aby se hustota (a tím i tlak) blížil požadované hodnotě. Mimo to se rychlosti předávají mezi blízkými částicemi pro efekt viskozity.

Kromě tekutiny jsou v typickém prostředí, kde jednobuněčné mikroorganismy žijí, různé látky, ze kterých získávají energii nebo stavební materiály. Aby se simulace vešla do paměti a zároveň lépe paralelizovala, jsou zde látky modelovány zjednodušeně jako čtveřice podčástí, které jsou červené, zelené, modré a šedé. Látky jsou symetrické vzhledem k rotaci (když se podčásti protočí, tak je to stále stejná látka). Lze je zobrazit jako čtyřcípou hvězdu s cípy obarvenými na jednu ze čtyř barev.



Obrázek 1: "látka" složená ze zelené, šedé, modré a modré podčásti

Chemické chování látek (tvorba vazeb a vazebná energie) je inspirováno chovním malé organické látky, která obsahuje jeden uhlík se čtyřmi skupinami. Červená podčást se vlastnostmi blíží karboxylové skupině, zelená hydroxylové, modrá jako aminové skuině a šedá neutrálnímu vodíku. Ke každé látce je přiřazena energie (slučovací entalpie) (uložená v jejích vazbách), která je určena takto:

$$\sum_{i}^{\text{podčásti}} E_{z(i)} + c(i) \cdot (f(\text{vedle i na jedné straně}) + f(\text{vedle i na druhé straně}) + \varphi(\text{naproti i}))$$

 E_z dává energii vazby mezi podčástí a středem látky. f určuje sílu indukčního efektu mezi vedlejšími pozicemi, φ mezi protějšími pozicemi. c dává sílu vlivu indukčního efektu z ostatních podčástí na podčást. Energie látek jsou tak rozmanité a jen občas shodné (ale jsou shodně pro překlopené látky) a můžeme získávat zajímavé výsledky při počítání s jejich rozdíly.

Každá částice (každá kapka tekutiny) v sobě může mít libovolné množství každé látky. V průběhu simulace látky difundují. Při rozptylování dané látky se koncentrace látky z každé částice rovnoměrně rozmístí do všech částic v okruhu se stejným poloměrem, jaký je dosah jejich silových interakcí.

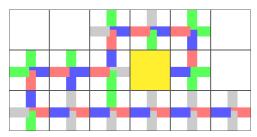
2.2. Proteiny

Nejdůležitějšími funkčními jednotkami v buňkách v tomto modelu jsou proteiny. Ty se skládají z aminokyselin, které se zřetězí a složí do tvaru, který jim umožní pracovat. Skládání proteinů je na tuto simulaci moc složité, a tak je zde model opět hodně zjednodušený. V tomto modelu jsou aminokyseliny definovány jako látky vybrané z látek, které obsahují červenou a modrou podčást:



Obrázek 2: látky vybrané jako proteinogení

Ze seznamu těchto látek pak skládáme protein tak, že za červený konec předchozí látky přidáme další látku tak, aby navazovala modrým koncem (jako translace probíhá od N-terminu k C-terminu za tvorby peptidických vazeb). Protože jsou látky pravoúhlé, skládají se jejich lineární řetězce do mřížky, která simuluje jejich prostorovou strukturu. Když existuje více možností, jak by se mohla další látka navázat, vybere se ta, která v řetězci červených a modrých podčástí pokračuje co nejdéle rovně.



Obrázek 3: ukázka proteinu (aa19c6a80100e (více v sekci genom)), žluté pole značí aktivní místo

Ze struktury je určena stabilita proteinu, což je podíl proteinů, která se nerozloží během jednoho kroku simulace:

$$\min(1-15\%\cdot e^{-s_c},99\%), s_c = \frac{n}{80} + \frac{n_e}{4}$$

kde n je počet polí v mřížce, kde je více látek najednou (protein překrývá sám se sebou - kříží) a n_e je počet míst, kde je více látek najednou a zároveň je vedle prázdného pole. Když se řetězec proteinu překříží, znamená to, že je zabalenější a je náročnější ho rozkládat, takže je stabilnější. Když je překryv vedle prázdného pole, musí řetězec postupovat stejnou cestou, se struktura zpevňuje a je o to více stabilnější.

2.2.1. Aktivní místa

V modelových proteinech se nacházejí aktivní místa, kde dochází k výměnám podskupin. Jako aktivní místa jsou definována prázdná pole, která mají na všech čtyřech sousedních polích právě jednu látku. Do takového místa se může vázat látka, která je doplňková k podčástem, které do aktivního místa míří. K červené a modré podčásti jsou navzajém doplňkové, zelené a šedé podčásti jsou doplňkové samy sobě. Obrázek 3 obsahuje vyznačené místo, do kterého by se vázala látka . Aktivní místa mohou být maximálně 4 (preferují se ty vlevo a poté nahoře).

V tomto modelu se aktivní místa, která jsou maximálně 4 pole od sebe (opět přednostně zleva a shora), spárují a katalyzují reakci výměny podčástí mezi látkami. Vyměňují se ty podčásti, které jsou k sobě nejblíže. Zbylá aktivní místa katalyzují reakci výměny vedlejších podčástí vázané látky, těch, které jsou nejblíže středu (těžišti) aktivních míst (přednostně nalevo nahoře). Pro Obrázek 3 bude výsledek reakce .

2.2 Model — Proteiny

Takto vytvořený model reakce umožňuje změnu podčástí podle struktury proteinu. Při mutaci může reakce, kterou protein provádí, zachovat, mírně pozměnit i radikálně změnit s nezanedbatelnými pravděpodobnostmi. Je snadné ho implementovat a je nenáročný na výpočet. Dokud nenastanou krajní připady, nezáleží na orientaci proteinu. (existuje ale významný krajní případ - jen jedno aktivní místo, pak na preferencích záleží).

2.2.2. Allosterická místa

Proteinům by neměla chybět možnost chovat se různě podle látek v jejich prostředí (aby buňky mohly měnit chování podle podnětů). Proto je součástí modelu allosterická modulace, která umožňuje proteinům obsahovat receptor a měnit podle něj svou efektivitu. Allosterická místa jsou v tomto modelu podobná aktivním - jsou to prázdná pole, která vedle sebe mají právě tři pole, která obsahují právě jednu látku. do takového místa se mohou vázat 4 různé látky, které mají tři podčásti doplňkové k těm v proteinu. Katalytický efekt je určen jako sin(vzdálenost allosterického od nejbližšího aktivního místa). Sinus byl vybrán pro svůj průběh, nemění se moc rychle, ale mění se, aby se při posouvání allosterického místa postupně měnil modulační efekt.

Podle modulačního efektu se určuje celkový efekt modulátorů na protein:

$$M = \max \left(0, 1 + \left(\sum_{i}^{\text{modulátory}} \max(f_i(c_m), 0)\right) + \left(\min_{i}^{\text{modulátory}} \min(f_i(c_m), 0)\right)\right)$$

(součet f_i(c_m), ale započítaná je jen nejnižší hodnota). kde c_m je koncentrace modulující látky v částici kde protein působí. f_i je funkce toho, jak látka ovlivňuje průběh reakce proteinu podle své koncentrace. podle modulačního efektu (m_e) se f_i přelévá mezi

$$\begin{split} f_{\rm aktiva\check{c}n\acute{i}}(c) &= c^2 \ ({\rm pro} \ \ m_e = 1) \\ \\ f_{\rm pot\check{r}ebn\acute{y}}(c) &= c^2 - 1 \ ({\rm pro} \ \ m_e = 0) \\ \\ f_{\rm inhibi\check{c}n\acute{i}}(c) &= -c \ ({\rm pro} \ \ m_e = -1) \end{split}$$

takto:

$$f_i(c) = \mathrm{lerp}\big(f_{\mathrm{pot\check{r}ebn\acute{y}}}, f_{\mathrm{akiva\check{c}n\acute{i}}}, m_e\big) \text{ pro } m_e > 0$$

$$f_i(c) = \mathrm{lerp}\big(f_{\mathrm{pot\check{r}ebn\acute{y}}}, f_{\mathrm{inhibi\check{c}n\acute{i}}}, \mathrm{smoothstep}(-m_e)\big) \text{ pro } m_e \leq 0$$

Pro allosterické aktivátory je přechod mezi funkcemi lineární, pro allosterické inhibitory je přidaný smoothstep k interpolačnímu koeficientu, aby se urychlil přechod přes bod, kde f_i vychází přibližně jako záporná konstanta.

2.2.3. Reakce

V tomto modelu mohou být uvnitř částic proteiny, které katalyzují reakce. Předpokládá se, že bez pomoci proteinu běží reakce zanedbatelně.

U reakcí jsou známé reaktanty a produkty, takže lze získat i změnu entalpie:

$$\Delta H = \sum_{i}^{\mathrm{produkty}} \Delta H(i) - \sum_{i}^{\mathrm{reaktanty}} \Delta H(i)$$

kde ΔH je již zmíněná slučovací entalpie látky. Pokud se zanedbá $\Delta S \cdot T$ (předpokladem pro to je, že se entropie během reakcí příliš nezmění), lze z

$$\Delta G = \Delta H - \Delta S \cdot T \to \Delta G = \Delta H$$

$$K = e^{-\frac{\Delta G}{RT}} \to K = e^{-\frac{\Delta H}{RT}}$$

spočítat rovnovážnou konstantu reakce. K té by se měl blížit poměr součinů koncentrací produktů a reaktantů, s rychlostí určenou sílou enzymatické katalýzy. Během kroku, kdy protein provádí danou reakci, se spočítá aktuální poměr (K'') a během kroku se změní na

$$K' = \operatorname{lerp} \bigl(K'', K, c_r \cdot M \cdot c_p \bigr)$$

kde c_r je konstanta rychlosti všech reakcí, M je efekt modulátorů a c_p je koncentrace proteinu. Nechť je δ změna koncentrací v tomto kroku. Pak

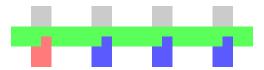
$$K' = \frac{\prod_{i}^{\text{produkty}} (c_{pi} + \delta)}{\prod_{i}^{\text{reaktanty}} (c_{ri} - \delta)}$$

$$K' \cdot \left(\prod_{i}^{\text{reaktanty}} (c_{ri} - \delta) \right) - \prod_{i}^{\text{produkty}} \left(c_{pi} + \delta \right) = 0$$

což je po roznásobení rovnice maximálně čtvrtého stupně v δ (protože maximum jsou 4 aktivní místa) a tak je řešitelná. Z řešení se vybere takové δ , které je v absolutní hodnotě nejmenší a zároveň nedostane žádnou koncentraci do záporné hodnoty. Pokud mělo přesáhnout do záporu, delta se zmenší.

2.2.4. Genom

Jako návod pro sestavení proteinu slouží genom. Ten je tvořen z látek 🕶 a 🛨, které jsou přes zelené podčásti spojené do řady (v tomto modelu jsou jen 2 báze):



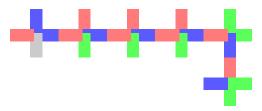
Obrázek 4: ukázka úseku genetického kódu (FTTT/8)

tento genetický kód začíná nalevo. Protože je aminokyselin více, než bází, genetický kód se dělí na kodony, které tu mají délku 4, aby mohly kódovat všech 14 zdejších aminokyselin. Genetický kód se přepisuje pomocí F a T, kde F značí červenou bázi a T modrou. Pro přehlednější zápis je i zápis po kodonech. Číslo v hexadecimálním zápisu, tedy číslice nebo

2.2 Model — Proteiny

malé písmeno z rozsahu a-f, značí jeden kodon. Každé číslo převedeme na kodon tak, že do genetického kódu přidáme F v případě lichého a T v případě sudého čísla. Poté číslo vydělíme dvěma a tento postup ještě třikrát zopakujeme. Přiřazení aminokyselin ke kodonům ukazuje okno "extra info" v aplkaci (v dokumentaci je i jeho obrázek).

Ke genomu se může vázat jiný typ proteinů, transkripční faktory. Pokud má protein na okraji obdélníku v mřížce, ve kterém se nacházejí, 7 po sobě jdoucích vystupujících červených nebo modrých podčástí, stává se z něj transkripční faktor. Ten ovlivňuje projevy genomu v místě, kde se na genom váže. Tedy v místě, kde obsahuje komplementární sekvenci bází (k červené se váže modrá a obráceně). Na ukázku genetického kódu (Obrázek 4) by se vázal například tento protein, ten ale není dostatečně dlouhý na to, aby opravdu byl transkripčím faktorem.



Obrázek 5: aa5553

Navázaný transkripční faktor blokuje v daném místě transkripci, z důvodu snadné implementace působí v místě nejblíže začátku genomu.

Pokud na okraji také obsahuje řadu alespoň tří zelených podčástí (ve stejném smyslu okraje jako v předchozích odstavcích), je transkripční faktor pozitivní a od daného místa transkripci spouští. Zelená část okraje slouží jako místo, na které nasedá ekvivalent RNA transkriptázy.

2.2.5. Speciální funkce

Modelové buňky potřebují k napodobení života dělat ještě několik věcí, které nespadají pod katalyzátory (enzymy) a transkripční faktory. Jednou z nich je dělení, při kterém se musí nakopírovat celý genom. Genom zde kopírují "genomové polymerázy", což jsou proteiny, které mají nanejvýš čtyři pole od sebe aktivní místa pro obě látky, ze kterých se tvoří genom (a). Tyto aktivní místa se nepodílí na reakcích. Kromě toho musí provádět nějakou jinou reakci, ze které získají energii pro tvorbu nového genomu. Vždy, když tuto reakci provede, namnoží se kousek genomu (nebo dojde k mutaci). Kopírování probíhá od začátku, postupně. Za každý kousek, k nakopírování je malá šance, že se přeskočí báze nebo kodon, že se přidá náhodná báze nebo kodon a nebo, nebo že místo, odkud se právě kopíruje, skočí na náhodné místo v celém genomu. Při přidávání určuje šance na vybrání báze jejich koncentrace (koncentrace látky je váha při náhodném výběru).

2.3. Buňky

3. Implementace

3.1. Použité technologie

4. Návod k použití

4.1. Kompilace

Na sestavení projektu je potřeba mít nainstalované následující programy a knihovny (knihovny se hledají pomocí find_package v CMake):

- kompilátor c++, který (dostatečně) podporuje c++23, například g++ 14 nebo novější nebo clang++ 18 nebo novější
- CMake 3.22 nebo novější
- sestavovací systém podporovaný cmake, například GNU make
- · knihovnu glm
- knihovny pro vulkan (včetně vulkan-hpp verze 1.4.309 nebo novější), typicky z LunarG Vulkan SDK (https://vulkan.lunarg.com/), ale pro linux bývají v repozitářích
- knihovnu vulkan memory allocator
- knihovnu boost 1.81 nebo novější (stačí komponenta math)

Vše lze dohromady systému Ubuntu nainstalovat následujícím bash skriptem, ale pravděpodobně je v repozitářích několik z těchto věcí v moc starých verzích:

```
sudo apt install build-essential cmake
sudo apt install vulkan-tools libvulkan-dev spirv-tools
sudo apt install libglfw3-dev libglm-dev libboost-dev

git clone https://github.com/GPUOpen-LibrariesAndSDKs/VulkanMemoryAllocator.git
cd VulkanMemoryAllocator
cmake -S. -Bbuild -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release
cmake --build build
sudo cmake --build build -t install
```

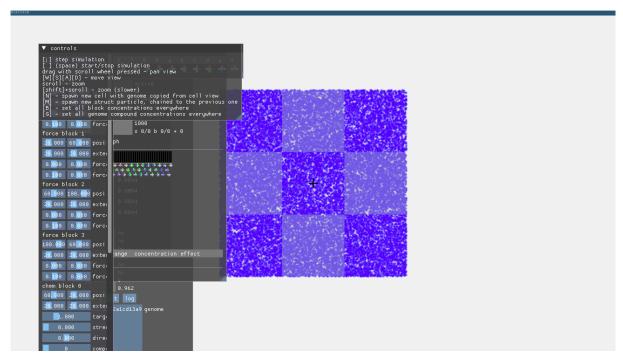
Tento projekt pak jde naklonovat a zkompilovat následujícím bash skriptem:

```
git clone --recurse-submodules https://github.com/nat-int/mikrosim.git
cd mikrosim
cmake -S. -Bbuild -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release -DVULKAN_VALIDATION=OFF \
    -DCOMPILE_SHADERS=OFF
cmake --build build
```

Výsledný spustitenlný soubour pak je ./out/mikrosim, případně ./out/mikrosim.exe, (relativně k cestě po příkazu cd mikrosim). Je ho potřeba spouštět ze složky ./out/.

4.2. Návod k aplikaci

Po prvním spuštění vypadá aplikace přibližně takto:



Obrázek 6: aplikace po spuštění

Obsahuje několik podoken, se kterými se dá levým tlačítkem myši pohybovat a připínat k hlavnímu oknu nebo do sebe navzájem. Mimo podoken je vidět zobrazení simulace (modrý čtverec za okny).

4.2.1. okno "Controls"

```
(; ) step simulation
[; ] step simulation
[] (space) start/stop simulation
drag with scroll wheel pressed - pan view
[W][S][A][D] - move view
scroll - zoom
[shift]+scroll - zoom (slower)
[N] - spawn new cell with genome copied from cell view
[M] - spawn new struct particle, chained to the previous one
[B] - set all block concentrations everywhere
[G] - set all genome compound concentrations everywhere
```

Okno "Controls" obsahuje seznam kláves/akcí pro interakci se zobrazením simulace s popisem jejich efektu.

4.2.2. okno "mikrosim"



Okno mikrosim začíná počtem snímků v poslední vteřině, poté text říkající, zda simulace běží a tlačítko, které simulaci spustí, nebo zastaví.

Na druhém řádku je posuvník, na kterém se nastavuje počet kroků simulace, které se provedou mezi každými dvěma snímky (když simulace běží).

Na třetím řádku je posuvník, na kterém se nastavuje látka, která se právě zobrazuje. Pod ním je obrázek dané látky a energie uložená v jejích vazbách.

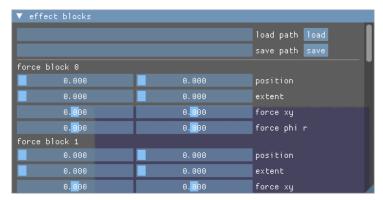
Další posuvník nastavuje koncentraci, na kterou klávesy G a B nastavují (když se stiskne klávesa B když žádné okno nemá "focus", tak se koncentrace všech proteinogeních látek nastaví na tuto hodnotu).

Následující 3 posuvníky nastavují vlastnosti tekutiny - hustotu, které se snaží dosáhnout, koeficient síly vyrovnávání hustoty a viskozitu.

Poslední posuvník nastavuje velikost částic při jejich vykreslování.

Pod posuvníky jsou tabulky s časy jednotlivých částí výpočtů simulace a vykreslování.

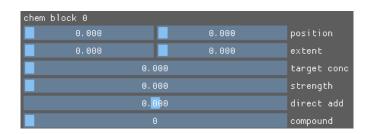
4.2.3. okno "effect blocks"



Toto okno obsahuje nastavení "efektových bloků", kterými se dá ovlivňovat simulace. Existují jich 2 typy: silové ("force blocks") a chemické ("chem blocks"). Silové bloky umožňují působit silou na částice v obdélníkové oblasti simulace. Chemické umožňují ovlivňovat koncentrace nějaké látky v obdélníkové oblasti simulace. Od obou typů jsou dostupné 4 bloky. Bloky se vykreslují přes zobrazení simulace s vysokou průhledností, silové bloky červeně a chemické zeleně.

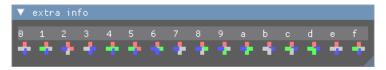
Na začátku jsou dvě textová pole s tlačítky - první umožňuje načíst nastavení všech bloků ze souboru, jehož cesta je napsána v textovém poli. Druhý umožňuje do souboru v textovém poli nastavení všech bloků uložit.

Pak následují nastavení silových bloků. Každé začíná pozicí a velikostí v osách x a y. Na třetím řádku posuvníků je nastavení homogení síly v osách x a y. Na čtvrtém řádku je nastavení síly kolem středu bloku (proti směru hodinových ručiček) a síla ke středu bloku. Síly jsou malé, takže chvilku trvá, než zapůsobí.



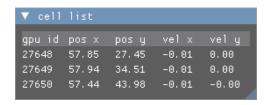
Poté následují nastavení chemických bloků. Stejně jako u silových bloků začínají dvěma řádky nastavení pozice a velikosti. Poté následuje cílová koncentrace, ke které se koncentrace přibližuje, poté síla, která určuje rychlost tohoto přibližování. Posuvník "direct add" udává koncentraci, která se přičítá ve všech částicím v oblasti. Nakonec je posuvník určující látku, kterou blok zrovna ovlivňuje (čísla látek jsou stejná jako v okně "mikrosim").

4.2.4. okno "extra info"



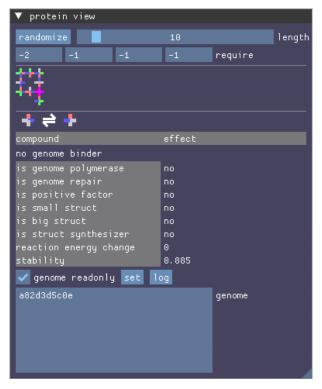
Okno extra info obsahuje tabulku pro převod mezi označením v genomu a látkou v proteinu.

4.2.5. okno "cell list"



Okno cell list obsahuje seznam všech živých buňek s jejich identifikačním číslem, pozicí a rychlostí.

4.2.6. okno "protein view"



Na začátku okna je ovládání generátoru proteinů. Po kliknutí na tlačátko "randomize" se začnou generovat náhodné proteiny délky nastavené na posuvníku vedle, dokud se nenajde takový, který splňuje podmínky. Podmínky se nastavují ve čtyřech textových polích na druhém řádku. Nápověda k nim se zobrazí, když na ně najedete myší.

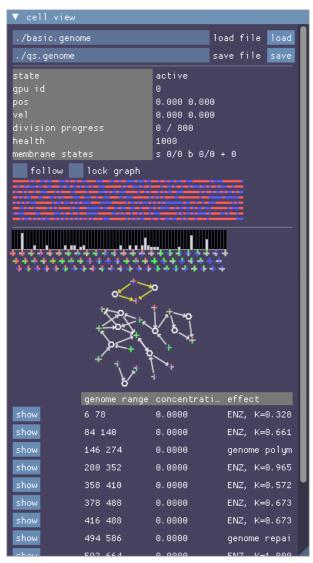
Následuje obrázek proteinu, který je v tomto okně vybraný. Pod ním je reakce, kterou katalyzuje a seznam modulátorů s jejich efektem.

Dále je informace o tom, na jaký úsek genetického kódu se váže.

Pod ní je tabulka speciálních vlastností a hodnot proteinu.

Na konci je textové pole, ve kterém je seznam kodonů právě vybraného proteinu se zaškrtávacím políčkem. Když je políčko zaškrtlé, tak pole nelze upravovat. Vedle jsou tlačítka "set", které vybere protein do okna a "log", které vypíše zprávu obsahující obsah pole na stdout.

4.2.7. okno "cell view"



Stejně jako okno "effect blocks", začíná toto okno poli na načítání a ukládání ze souboru. Při načítání ze souboru se ze souboru přečtou znaky označující kodony a báze (0-9, a-f, T, F) a do okna se vybere buňka s takovým genomem. Soubor může obsahovat komentáře, které začínají středníkem a končí odřádkováním.

Poté je v okně tabulka informací o buňce - stav, identifikátor, pozice, rychlost, pozice dělicí hlavice, zdraví a stavy membrány (první dvojice čísel je množství malé struktury a využité množství malé struktury, druhá dvojice je pro velkou strukturu a poslední číslo je postup v tvorbě membrány).

Dále jsou zaškrtávací pole "follow" a "lock graph". Pokud je "follow" zaškrtnuto, pohled ve zobrazení následuje vybranou buňku. Když je zaškrtnuto "lock graph", tak se graf metabolismu (o kterém bude řeč níže) nepohybuje.

Následuje genom buňky nakreslený jenom barvami bází. Když se myší najede na protein v seznamu proteinů (o kterém také bude řeč později), podtrhne se žlutě místo, kde je v genomu kódován. Pokud je to transkripční faktor, vyznačí se fialově místa, kam se váže. Zároveň se

ukazují bílou místa, kde se působí negativní transkripční faktory a zelenou místa, kde působí pozitivní transkripční faktory.

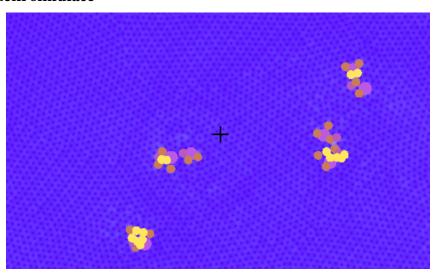
Dále se nachází graf koncentrací látek ve vybrané buňce. Když se myší najede na protein v seznamu proteinů, tak se červeně vyznačí jeho reaktanty, zeleně produkty a modře modulátory. Barvy zvýraznění se mísí, takže žlutě zvýrazněný sloupek znamená, že je látka reaktant i produkt.

Okno pokračuje grafem metabolismu, kde šestiúhelníky značí proteiny a vykreslují se šipky k proteinům od jejich reaktantů a od proteinů k jejich produktům. Šipky působí jako pružiny a látky a proteiny se od sebe odpuzují. Žluté šipky značí, že protein během dané reakce provádí speciální akci. Držením kolečka myši lze pohybovat s pohledem v grafu, držením levého kolečka a pohybem myši vertikálně lze zvětšovat a zmenšovat zorné pohled. Levým tlačítkem lze s proteiny a látkami pohybovat.

Další je seznam proteinů. Při kliknutí na tlačítko "show" se daný protein vybere do okna "protein view". Dále seznam obsahuje koncentraci proteinů a zkrácený zápis toho, co protein dělá.

Nakonec je v okně tlačítko test, které provede testy na funkci počítající chemické reakce.

4.2.8. zobrazení simulace



Na pozadí je šachovnice, kde strana každého políčka má délku stejnou, jako je dosah interakcí částic. Částice tekutiny se vykreslují modře až světle modře podle své koncentrace látky, která je vybrána v okně "mikrosim". Buňky a velké strukturní částice se vykreslují fialově až světle modře. Malé struktruní částice se vykreslují oranžově. Strukturní částice se vykreslují žlutě.

Ve zobrazení lze držením kolečka myši nebo klávesami W (nahoru), S (dolu), A (vlevo) a D (vpravo) pohybovat s pohledem. Točením kolečkem myši se pohled přibližuje / oddaluje. Při držení levé klávesy shift jsou pohyby (až na tah se zmáčknutým kolečkem myši) pomalejší.

Středníkem se provede jeden krok simulace, mezerníkem se spustí nebo pozastaví.

Klávesou N se v místě křížku uprostřed obrazovky přidá nová buňka s genomem zkopírovaným od vybrané buňky z okna "cell view", pokud vybraná buňka není mrtvá.

Klávesou G se nastaví koncentrace látek, ze kterých se tvoří genom, ve všech částicích na hodnotu nastavenou v okně "mikrosim". Klávesa B má podobný efekt, jen nastavuje koncentrace všech modelových aminokyselin.

5. Závěr

6. Odkazy