

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕЙРОННОЇ АКТИВНОСТІ (МОДЕЛЬ ФІТЦХЬЮ-НАГУМО) З ВИКОРИСТАННЯМ PYTHON

Бондаренко Роман

Науковий керівник: канд. тех. наук., доцент Ткачук А. І.

*Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка,
м. Кропивницький, Україна*

У роботі розглянуто актуальну задачу розробки спеціалізованого програмного забезпечення для дослідження нелінійної динаміки збудливих біологічних систем. Об'єктом дослідження є математична модель ФітцХью-Нагумо, яка є канонічним спрощенням біофізичної моделі Ходжкіна-Хакслі. Метою роботи є створення інтерактивного програмного комплексу мовою програмування Python для чисельного моделювання та якісного аналізу цієї системи. В ході дослідження обґрунтовано вибір технологічного стеку, що включає бібліотеки NumPy та SciPy для виконання наукових обчислень, Matplotlib для візуалізації даних та фреймворк PyQt для реалізації графічного інтерфейсу користувача. Запропоновано архітектуру додатку, що базується на принципі розділення відповідальності (патерн MVC), що забезпечує гнучкість та розширюваність коду. Розроблений програмний комплекс «FHN-Solver» дозволяє в реальному часі досліджувати вплив параметрів моделі, зокрема вхідного стимулу, на динаміку системи. Проведено серію обчислювальних експериментів, в результаті яких успішно відтворено та візуалізовано ключові динамічні режими нейрона: стабільний стан спокою, генерацію одиночного потенціалу дії (спайку) та режим автоколивань (граничний цикл). Практична значимість роботи полягає у створенні ефективного інструменту для використання в освітньому процесі та наукових дослідженнях у галузі обчислювальної нейронауки.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, модель ФітцХью-Нагумо, нелінійна динаміка, фазовий портрет, Python, SciPy, PyQt, чисельні методи.

Computer modeling of neural activity (Fitzhugh-Nagumo model) using Python

R. Bondarenko

Scientific supervisor: Candidate of Technical Sciences, associate professor Tkachuk A.I.

Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State University, Kropyvnytsky, Ukraine

The paper addresses the actual problem of developing specialized software for researching the nonlinear dynamics of excitable biological systems. The object of the study is the FitzHugh-Nagumo mathematical model, which represents a canonical simplification of the biophysical Hodgkin-Huxley model. The aim of the work is to create an interactive software complex in the Python

programming language for numerical modeling and qualitative analysis of this system. The study substantiates the choice of the technology stack, which includes NumPy and SciPy libraries for scientific computing, Matplotlib for data visualization, and the PyQt framework for implementing the graphical user interface. An application architecture based on the separation of concerns principle (MVC pattern) is proposed, ensuring code flexibility and extensibility. The developed "FHN-Solver" software complex allows for real-time investigation of the model parameters' influence, particularly the input stimulus, on the system dynamics. A series of computational experiments were conducted, successfully reproducing and visualizing key neuronal dynamic regimes: stable resting state, generation of a single action potential (spike), and self-sustained oscillations (limit cycle). The practical significance of the work lies in creating an effective tool for educational purposes and scientific research in the field of computational neuroscience.

Keywords: computer modeling, FitzHugh-Nagumo model, nonlinear dynamics, phase portrait, Python, SciPy, PyQt, numerical methods.

Постановка проблеми. На сучасному етапі розвитку науки розуміння принципів функціонування людського мозку залишається одним із найбільш складних та пріоритетних викликів. Обчислювальна нейронаука (Computational Neuroscience), що виникла на перетині нейробіології, математики та комп'ютерних наук, пропонує потужний інструментарій для вирішення цього завдання через математичне моделювання. Моделювання дозволяє досліджувати динамічні процеси у збудливих структурах, перевіряти гіпотези, які складно або неможливо верифікувати в ході прямих біологічних експериментів (in vivo або in vitro), та прогнозувати поведінку нейронних мереж.

Серед широкого спектра математичних моделей особливе місце займають моделі, що описують генерацію та поширення потенціалу дії — основного механізму передачі інформації в нервовій системі. Хоча канонічна модель Ходжкіна-Хакслі забезпечує високу біофізичну точність, її обчислювальна складність та висока вимірність обмежують її застосування при дослідженні великомасштабних мереж або при необхідності швидкого якісного аналізу. У цьому контексті актуальним стає використання редукованих моделей, зокрема моделі ФітцХью-Нагумо, яка зберігає ключові динамічні властивості збудливості при значному математичному спрощенні.

Однак, незважаючи на глибоку теоретичну опрацьованість самої моделі, існує певний розрив між теоретичним описом системи диференціальних рівнянь та наявністю доступних, сучасних програмних засобів для їх інтерактивного дослідження. Більшість існуючих рішень являють собою або закриті комерційні пакети, або розрізнені скрипти, що не мають зручного графічного інтерфейсу. Тому виникає нагальна науково-практична проблема розробки спеціалізованого програмного забезпечення на базі сучасних відкритих технологій (Python), яке б поєднувало ефективність чисельних методів з інтерактивністю візуалізації, надаючи дослідникам гнучкий інструмент для вивчення нелінійної динаміки нейронів.

Аналіз досліджень і публікацій. Фундаментальною основою для математичного моделювання збудливих клітин стала робота А. Ходжкіна та Е. Хакслі [4], які у 1952 році запропонували чотиривимірну систему диференціальних рівнянь для опису іонних струмів у гігантському аксоні кальмара. Ця модель забезпечує високу біофізичну точність, проте її значна обчислювальна складність стимулювала пошук ефективніших математичних абстракцій. У 1961 році Р. ФітцХью [1] запропонував двовимірну редукцію цієї системи, виділивши змінні "збудження" та "відновлення", а у 1962 році Д. Нагумо зі співавторами [8] реалізував аналогічну систему у вигляді електронного ланцюга з тунельним діодом. Отримана модель ФітцХью-Нагумо (ФХН) стала канонічною для дослідження якісних аспектів збудливості.

Теоретичний аналіз моделі ФХН детально висвітлено у працях Ю. Іжикевича [6] та Дж. Кінера [7]. Автори розглядають систему з позицій теорії динамічних систем, акцентуючи увагу на біфуркаційному аналізі та фазових портретах, що дозволяє пояснити переходи між режимом спокою та автоколиваннями. Однак, при чисельному моделюванні таких систем виникає проблема "жорсткості" (stiffness), зумовлена різницею часових масштабів змінних. Е. Хайрер та Г. Ваннер [2] у своїх фундаментальних працях з чисельних методів обґрунтовують необхідність використання неявних методів інтегрування (наприклад, BDF) для забезпечення стійкості розв'язку таких задач.

Сучасний етап розвитку наукового моделювання нерозривно пов'язаний з використанням екосистеми мови Python. Бібліотека NumPy [3] стала стандартом для векторизованих обчислень, забезпечуючи ефективність, порівнянну з мовами C/Fortran. Для розв'язання диференціальних рівнянь ключовим інструментом є бібліотека SciPy [10], модуль integrate якої містить реалізації сучасних адаптивних алгоритмів. Для візуалізації результатів моделювання де-факто стандартом є бібліотека Matplotlib [5], що дозволяє будувати високоякісні графіки. Питання створення графічних інтерфейсів користувача (GUI) для наукових додатків ефективно вирішується за допомогою фреймворку PyQt [9], який дозволяє інтегрувати обчислювальні модулі Python у повноцінні десктопні додатки.

Незважаючи на широку теоретичну базу та наявність потужних бібліотек, у науковій літературі недостатньо уваги приділяється саме методології об'єднання цих компонентів у єдині інтерактивні програмні комплекси для освітніх та дослідницьких цілей, що і зумовлює мету даної роботи.

Метою статті є розробка архітектури та програмна реалізація інтерактивного комплексу мовою Python для чисельного моделювання динаміки нейронної активності на основі моделі ФітцХью-Нагумо. Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання: виконати математичну постановку задачі та якісний аналіз моделі на фазовій площині; обґрунтувати вибір програмних засобів та спроектувати об'єктно-орієнтовану структуру додатку; реалізувати графічний інтерфейс користувача для керування параметрами моделі в реальному часі; провести серію обчислювальних експериментів для верифікації роботи комплексу та демонстрації основних динамічних режимів нейрона (спокій, збудження, автоколивання).

Виклад основного матеріалу (результатів) дослідження. Математичною основою розробленого програмного комплексу є модель ФітцХью-Нагумо, яка описує динаміку збудливої мембрани через систему двох зв'язаних нелінійних звичайних диференціальних рівнянь. Перше рівняння описує еволюцію швидкої змінної $v(t)$, що відповідає мембранному потенціалу, та містить кубічну

нелінійність $f(v) = v - v^3/3$. Друге рівняння описує динаміку повільної змінної відновлення $w(t)$, яка лінійно залежить від потенціалу. Система має вигляд: $dv/dt = v - v^3/3 - w + I$ та $dw/dt = (av - bw) / \tau$, де I — зовнішній стимулюючий струм, а параметри a , b , τ визначають кінетику відновлення. Ключовою особливістю системи є наявність різних часових масштабів, що зумовлює її обчислювальну жорсткість та вимагає застосування стійких неявних чисельних методів інтегрування.

Для дослідження динамічних властивостей моделі застосовано метод фазової площини, який базується на аналізі нуль-ізоклін — кривих, на яких похідні змінних стану дорівнюють нулю. v -нуль-ізокліна являє собою N -подібну кубічну криву, положення якої по вертикалі регулюється параметром I , тоді як w -нуль-ізокліна є прямою лінією, що проходить через початок координат. Перетин цих кривих визначає стаціонарні точки системи, а їхня стабільність диктує глобальну поведінку нейрона. Зі збільшенням вхідного струму I змінюється топологія перетину ізоклін, що призводить до біфуркацій — якісних змін у динаміці системи, зокрема біфуркації Андронова-Хопфа, яка відповідає переходу від стану спокою до автоколивань.

З метою автоматизації досліджень та візуалізації зазначених процесів було розроблено програмний комплекс «FHN-Solver». Архітектура додатку спроектована на основі об'єктно-орієнтованого підходу з використанням патерну «Модель-Вигляд-Контролер», що забезпечує чітке розмежування обчислювального ядра та графічного інтерфейсу. Обчислювальний модуль реалізовано з використанням бібліотек NumPy та SciPy. Для чисельного інтегрування системи застосовано метод BDF (Backward Differentiation Formulas) функції `scipy.integrate.solve_ivp`, що гарантує високу точність та стабільність розв'язку жорсткої системи диференціальних рівнянь. Графічний інтерфейс користувача реалізовано на базі фреймворку PyQt, який забезпечує інтерактивну взаємодію з моделлю. Візуалізація результатів, включаючи часові ряди та фазові портрети, виконується бібліотекою Matplotlib, полотно якої інтегровано безпосередньо у вікно додатку. Така реалізація дозволяє досліднику змінювати

параметри моделі в реальному часі за допомогою віджетів керування та миттєво спостерігати реакцію системи.

Верифікація розробленого програмного комплексу була проведена шляхом серії обчислювальних експериментів, спрямованих на відтворення трьох фундаментальних динамічних режимів нейрона. У першому експерименті при підпороговому значенні вхідного струму ($I=0.1$) модель продемонструвала швидку релаксацію до єдиної стабільної точки рівноваги, що відповідає стану спокою. На фазовому портреті це відображається як траєкторія, що асимптотично наближається до точки перетину ізоклін на лівій гілці кубічної кривої.

У другому експерименті при збільшенні струму до надпорогового рівня ($I=0.5$), але недостатнього для автоколивань, було зафіксовано генерацію одиночного потенціалу дії. Система демонструє збудливість: фазова траєкторія здійснює велику екскурсію по фазовій площині, обходячи нестабільну гілку ізокліни, після чого повертається до початкового стабільного стану. Часова реалізація цього процесу має характерну форму спайку з фазами деполяризації, реполяризації та рефрактерності.

Третій експеримент при значному рівні стимуляції ($I=1.0$) підтвердив перехід системи у режим стійких автоколивань. Внаслідок втрати стійкості єдиною стаціонарною точкою, у системі формується стабільний граничний цикл. На фазовій площині спостерігається замкнена траєкторія, до якої притягуються всі фазові криві, а часові ряди демонструють періодичну послідовність ідентичних спайків. Отримані результати повністю корелюють з теоретичними передбаченнями, підтверджуючи адекватність розробленої моделі та ефективність програмної реалізації.

Висновки та перспективи подальших пошуків у напрямі дослідження.

У результаті виконаного дослідження вирішено актуальну науково-прикладну задачу розробки спеціалізованого програмного забезпечення для моделювання нелінійної динаміки нейронних структур. Шляхом поєднання методів якісної теорії диференціальних рівнянь та сучасних технологій об'єктно-орієнтованого

програмування створено інтерактивний комплекс «FHN-Solver». Реалізована архітектура додатку, що базується на бібліотеках наукового стеку Python (SciPy, NumPy, Matplotlib, PyQt), забезпечила високу обчислювальну ефективність та точність чисельного інтегрування жорсткої системи рівнянь, а також гнучкість графічного інтерфейсу. Проведені обчислювальні експерименти підтвердили адекватність побудованої комп'ютерної моделі, яка коректно відтворює фундаментальні біофізичні режими: стан спокою, порогову генерацію одиночного імпульсу та виникнення стійких автоколивань внаслідок біфуркації Андронова-Хопфа. Практична цінність одержаних результатів полягає у створенні доступного та ефективного інструментарію, що дозволяє візуалізувати складні абстрактні концепції нелінійної динаміки, що є критично важливим для підвищення якості освітнього процесу та прискорення попереднього етапу наукових досліджень у галузі обчислювальної нейронауки.

Перспективи подальших розвідок у даному напрямі пов'язані з масштабуванням та розширенням функціоналу розробленого програмного комплексу. Зокрема, пріоритетним вбачається перехід від дослідження точкової моделі (системи звичайних диференціальних рівнянь) до аналізу просторово-розподілених систем (рівнянь у частинних похідних типу реакція-дифузія). Це дозволить моделювати процеси поширення хвиль збудження у збудливих середовищах та досліджувати механізми виникнення спіральних хвиль, що має важливе значення для кардіології. Іншим перспективним напрямом є реалізація можливості моделювання мереж зв'язаних осциляторів ФітцХью-Нагумо, що відкриє шлях до вивчення колективних динамічних ефектів, таких як синхронізація нейронних ансамблів та формування патернів активності.

Список використаної літератури:

1. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane // Biophysical Journal. – 1961. – Vol. 1, No. 6. – P. 445–466.
2. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems. – 2nd ed. – Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1996. – 614 p.
3. Harris C. R. et al. Array programming with NumPy // Nature. – 2020. – Vol. 585, No. 7825. – P. 357–362.

4. Hodgkin A. L., Huxley A. F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve // The Journal of Physiology. – 1952. – Vol. 117, No. 4. – P. 500–544.
5. Hunter J. D. Matplotlib: A 2D Graphics Environment // Computing in Science & Engineering. – 2007. – Vol. 9, No. 3. – P. 90–95.
6. Izhikevich E. M. Dynamical Systems in Neuroscience: The Geometry of Excitability and Spiking. – Cambridge, MA : The MIT Press, 2007. – 464 p.
7. Keener J. P., Sneyd J. Mathematical Physiology. – New York : Springer-Verlag, 1998. – 790 p.
8. Nagumo J. S., Arimoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon // Proceedings of the IRE. – 1962. – Vol. 50, No. 10. – P. 2061–2070.
9. Summerfield M. Rapid GUI Programming with Python and Qt: The Definitive Guide to PyQt Programming. – Upper Saddle River, NJ : Prentice Hall, 2008. – 648 p.
10. Virtanen P. et al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python // Nature Methods. – 2020. – Vol. 17, No. 3. – P. 261–272.

Відомості про автора:

Бондаренко Роман Сергійович – студент II курсу магістратури факультету інформаційних технологій, математики та природничих наук Центральноукраїнського державного університету імені Володимира Винниченка, тел. +380958946266, e-mail: 12026047@cuspu.edu.ua.