

**Галка Ярослав**  
студент 1 курсу спеціальності 201 «Агрономія»  
Науковий керівник: **Мушеник І.М.**

канд. екон. наук, доцент кафедри математичних дисциплін,  
інформатики і моделювання

Подільський державний аграрно-технічний університет  
м. Кам'янець-Подільський,

## **ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В БІОЛОГІЇ**

Розглядається сучасний стан проблеми інформаційних технологій в молекулярній та клітинній біології, біохімії дослідженнях навколишнього середовища. Наводяться приклади створення відповідних математичних і комп'ютерних моделей та програм в різних країнах.

Застосування математичних методів та інформаційних систем в біології набуває все більшого значення. На теперішній час вчені можуть використовувати комп'ютерні моделі для біологічних систем різного рівня, починаючи з геному і закінчують екосистемами, в яких існують складні й розгалужені взаємозв'язки.

Розбираючи життя на дрібніші складові (організми-на органи, тканини-на клітини, хромосоми на ДНК і гени), наукові ідентифікували геном людини. Проте чи не найскладніше зібрати всі отримані дані в єдину систему та усвідомити їх. Саме за допомогою комп'ютерних моделей усі біохімічні фрагменти можна скласти в єдину картину. Фундаментальні процеси біології клітини, такі як ріст, сприйняття та передача сигналів, диференціювання та смерть, є унікальним комплексом, що залежить від величезної кількості різноманітних молекул та молекулярних взаємодій.

Галузь «системна біологія» використовує обчислювальні методи для того, щоб на основі великої кількості даних відбирати та ідентифікувати окремі молекули, які беруть участь у певних клітинних реакціях, а також виявляти статистику існуючих міжмолекулярних взаємодій. Такі кількісні дані та дослідження можуть бути важливими для розуміння того, як оперувати

великими комплексними біохімічними системами, що включаються в метаболічні та сигнальні мережі.

Однією з основних перешкод, з якими стикаються сучасні біологи, є відсутність у більшості з них математичного мислення. Щоправда, кілька останніх можна помітити посилення впливу математично мислячих біологів. Мікробіологи використовують комп'ютери для моделювання біохімії клітин. Одні намагаються будувати моделі, що враховують усі важливі реакції, котрі відбуваються всередині бактеріальної клітини, інші застосовують технологічний підхід, тобто описують поведінку клітини за допомогою основних хімічних, фізичних і біологічних законів, яким вона підпорядковується. Так, для розуміння біофізичних механізмів, які лежать в основі функцій клітинних систем, та для потреб кількісної клітинної біології дослідниками з Центру здоров'я Коннектикутського університету (США) було розроблено програмне забезпечення моделювання середовища клітини, назване «Віртуальною клітиною».

Біологічна модель віртуальної клітини складається з трьох частин: «фізіологічна модель», що містить механістичні гіпотези; один чи більше «додатків», де експериментальні умови, геометрія та подібність моделювання вводяться в математичну задачу; одна або більше «імітацій», кожна з яких являє собою низку розв'язань математичної задачі, сформульованої в «додатку».

За допомогою створеної моделі було імітовано процеси внутрішньоклітинного транспорту деяких речовин, а також транспорт речовин між ядром і цитоплазмою.

Ще у 1994 році дослідники з Інституту молекулярних наук при Каліфорнійському університеті в Берлі та університету Вісконсін (США) почали створення комп'ютерної моделі, яка містила практично всі відомості про те, як бактеріофаг T7 інфікує кишкову паличку. Генетичний матеріал фага примушує репродуктивний апарат клітини штампувати клони-бактеріофаги, поки клітина не розірветься. Створена модель математично відтворює трансляцію всіх 56

генів вірусу в 59 білків, руйнування клітини цими білками і навіть виникнення у вірусу стійкості до різних препаратів на основі РНК.

Проте, якщо «заглибитись у ріння», можна побачити, що варіативність процесів залишається неймовірною. Рівняння можна налаштувати на відтворення будь-якої поведінки. Тому, на основі більш витончено сконструйованих моделей клітин виник принцип «міцності». Будь-який тип життя має давати собі раду, знаходячись під впливом різних перепадів температур, змін у постачанні їжі, нападів ззовні та зсередини. Щоб вижити і процвітати, клітини повинні мати резервні системи та біологічні мережі, толерантні до різних впливів.

Співробітники лабораторії біоінформатики університету Кейо у Фуджісаві (Японія) спостерігали за виникненням цієї властивості у віртуальних зі створеною ними моделлю «Е-клітини». Цю віртуальну клітину побудували зі 127 генів, узятих переважно з одноклітинного організму *Mycoplasma genitalium*, який має найменший геном серед досліджуваних самовідтворюваних форм життя. Кінцевою метою групи було знайти мінімальну кількість генів, необхідних для створення самодостатнього організму, а потім синтезувати його. Дослідники були здивовані, коли, змінивши на декілька порядків моделі, не побачили реакції клітин.

Серед наукових підходів, які використовуються досить рідко, математичне моделювання відіграє винятково важливу роль. Деякі біологи, котрі серйозно займаються моделюванням, підозрюють, що найсильніше на реакцію клітини у відповідь на ліки або хворобу впливає не посилення чи послаблення одного білка, а те, як динамічно взаємодіють усі гени та білки. Один з науковців-комп'ютерників зі Стенфордського університету (США), Дж. Коза, розробив комп'ютерну технологію з програмами, здатними еволюціонувати. Комп'ютер створює випадкові програми за інструкцією, постійно змінює їх і відбирає ті, які найкраще справляються із завданням. Використовується генетичне програмування для відтворення малої, але заплутаної частини моделі Е-клітини, котра сама побудована з програм, що проводяться як гени. Вчений пристосував

свою систему для створення програм, які з відомих ферментів складають хімічний механізм, що перетворює жирну кислоту й гліцерин у діацилгліцерол. Для надійності кожен варіант програм був перетворений на еквівалентне електричне коло. Біологічні «кола», що найточніше збігалися та еволюцію вали далі, а решта знищувалася. Була створена програма, яка відтворювала реальну реакційну мережу. Вона містила чотири ферменти, п'ять проміжних сполук, усі правильні зворотні зв'язки та підраховувала точні швидкості реакцій для кожного з елементів.

Серед ферментативних процесів, які успішно описує рівняння Міхаеліса – Мента (з інгібуванням чи без нього та сталих ферментної активації), є випадки, коли дуже важко отримати математичне рішення. Зокрема, дослідження гідролізу крохмалю за допомогою аміолітичних процесів у промисловості – призвело до формулювання дуже складних рівнянь або емпіричного встановлених виразів. При моделюванні складу субстрату й аміолітичних ферментів можуть з'являтися проблеми, пов'язані з математичним описом самого процесу ферментативного розщеплення крохмалю. Крохмаль містить лінійні та розгалужені молекули. Штучні нейромережі дають можливість картувати нелінійні зв'язки без попередньої інформації про процес або системну модель. Моделювання за допомогою нейромереж, хоч і не замінює розуміння процесу, проте дозволяє швидко розвивати моделі складних реакцій. При застосуванні нейромереж для динамічного моделювання гідролізу крохмалю глюкозамізою гриба *Aspergillus niger* з'ясувалося, що перебіг реакції сахарифікації крохмалю здійснюється за двома напрямками, які характеризуються дуже високою та дуже низькою її швидкістю. Це можливо завдяки наявності в крохмалі фракцій, більш або менш чутливих до де полімеризації. Оскільки реакція в цілому виявляється дуже складною за своїми кінетичними характеристиками, використання штучних нейромереж було доцільним, причому для кожного напрямку реакції застосовувалися дві різні нейромережеві архітектури. У підсумку був зроблений висновок, який корелює з результатами

математичного моделювання гідролізу крохмалю: субстрат потрібно розділяти на дві фракції, що мають різну сприятливість до ферментативного гідролізу.

Для моделювання біологічних процесів використовуються різні комп'ютерні моделі та програмне забезпечення. Так, дослідниками з Будапештського технологічного університету (Угорщина) використовувалися інструментарій, придатний для математичного моделювання, створений на основі програмного забезпечення MATLAB. Крім традиційних методик *in vivo* та *in vitro*, згадане математичне моделювання є ефективною методологією з точки зору економії як коштів, так і часу. Ця програмна система забезпечує розв'язання систем диференціальних рівнянь за допомогою легких у використанні графічних поверхонь. Для моделювання технологічних біопроцесів зручно описувати динамічну поведінку великої кількості різноманітних ензимів, ферментативних та екологічних систем. Надзвичайно вигідним є те, що випадкове втручання також можна змодельовати й представити графічно у різний спосіб. Представлення кінетики цих систем, як правило, складається зі звичайних систем диференціальних рівнянь, розв'язання яких є можливим завдяки відомим комерційним системам програмного забезпечення та випробувальним версіям програм. Науковці з Будапештського технологічного університету провели роботу, метою якої було покращення деяких недоліків інструментарію моделювання MATLAB.

Технологічні виробництва часто пов'язані із забрудненням довкілля та у процеси довкілля та втручанням у процеси біогенної міграції атомів. Починаючи з періоду індустріалізації (останні 150 років) концентрація вуглекислого газу в атмосфері істотно зросла і продовжує підвищуватися на 0,45% щорічно, переважно внаслідок спалювання палива, вирубування лісів та інших змін у землекористуванні. Відповідно до результатів моделювання при такому розвитку подій вже до 2010 року концентрація вуглекислого газу в атмосфері зросте майже втричі, середня температура біля поверхні Землі збільшиться на 5,5 °C, а біологічна продуктивність рослин різко зменшиться. У вказаній ситуації

людство має обдумувати кожен крок, незалежно від того, стосується це використання нових земель під сільськогосподарські угіддя чи розробки нафтового родовища. Для прийняття оптимальних рішень необхідно оцінити вуглецевий баланс кожного регіону, тобто підраховувати кількість карбону, що викидається в атмосферу внаслідок життєдіяльності біоти й антипогенного впливу та асимілюється рослинами даного регіону. На підставі цих результатів можна корегувати господарську діяльність, щоб звести баланс до нуля. Для оцінки такого балансу застосовують математичні моделі біохімічного циклу карбону. Подібні роботи було здійснено протягом 90-х років ХХ ст.. науковцями США, України та Росії для різних регіонів цих країн.

При створенні математичної моделі слід мати на увазі, що об'єктом дослідження є жива система, здатна пристосовуватися до умов довкілля для підтримання гомеостазу не тільки пристосовуватися, а й змінювати його. Математичне моделювання дає цікаві результати пристосування рослинного світу до змін навколишнього середовища. Так, була змодельована ситуація, за якої з підвищенням температури біля поверхні землі може настати момент, коли кількість виділеного дихання карбон переважатиме кількість поглиненого в процесі асиміляції. Це призведе до втрати рослинами енергії, і вони загинуть.

Проблеми, що стосуються очищення стічних вод від різного роду забруднень, є не менш актуальними, ніж проблеми очищення атмосфери. Карбон і нітроген є органічними елементами, які відіграють надзвичайно важливу роль у метаболізмі та підтриманні гомеостазу живих організмів. Саме тому повернення цих елементів є дуже актуальним. Використання культури анаеробних бактерій та дріжджів для очищення стічних вод є ефективним та економічним методом, що поєднує вилучення нітрогену та карбону із забрудненої води з продукуванням корисного харчового матеріалу. Бактеріальні ферменти перетворюють органічний нітроген та карбоновмісні субстрати на амоніакний нітроген та жирні кислоти різного складу, що містять субстрати, придатні до засвоєння дріжджами, які в той же час перетворюють ці поживні речовини тільки на клітинний білок. Згаданий метод очищення дає також цікаву

можливість очищення та біологічної переробки нітрогену та карбону на форму мікробної біомаси у двох біореакторах.

Таким чином, у сучасній біології дедалі більше використовується комп'ютерне моделювання, яке застосовується для різнорівневих біологічних систем, починаючи молекулярними і закінчуючи біосферними. Інформаційні технології та системи істотно прискорюють і полегшують здійснення біологічних досліджень та є перспективними в цій галузі.

### Список використаних джерел

1. Бурлаков О.С., Кінаш І.А. Інформаційні технології в управлінні сучасним підприємством. *Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні проблеми інвестиційної діяльності в Україні»* (м. Київ, 18-19 січня 2013 р.).
2. Гороховатська О. Я. Інформаційні технології в біологічних дослідженнях. Стан проблеми. *Наука та наукознавство*. 2004. № 2. С. 74-79.
3. Гриценко В. И. Информационные технологии как метод познания в биологии и медицине. *Упр. системы и машины*. 2005. № 3. С. 12-15.
4. Іванишин В. В. Стратегія розвитку сільського господарства через призму впровадження сучасних технологій. *Техніка АПК*. 2005. № 10-11. С. 6.
5. Інформаційні технології в біології та медицині : курс лекцій / В. І. Гриценко та ін. Київ, 2007. 384 с.
6. Мушеник І.М. Закордонний досвід формування регіональних інноваційних систем (на прикладі Австрії). *Наукові записки Національного університету «Острозька академія», серія «Економіка»*, 2017. Випуск 5. С 72-77.