

Владислав Крузер

студент ІСТН курсу спеціальності 201 «Агрономія»

Науковий керівник: **І.М.Мушеник,**

канд. екон. наук, доцент кафедри математичних дисциплін,

інформатики і моделювання

Подільський державний аграрно-технічний університет,

м. Кам'янець-Подільський

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В БІОЛОГІЇ

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), науковці 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 [3].

Біологічна модель віртуальної клітини складається з трьох частин: «фізіологічна модель», що містить механічні 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 [1].

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.

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 еволюціювати. 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 E-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 еволюціювали 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 [2].

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.

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.

Таким чином, у сучасній біології дедалі більше використовується комп'ютерне моделювання, яке застосовується для різноманітних 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. Гороховатська О. Я. Інформаційні технології в біологічних дослідженнях. Стан проблеми. *Наука та наукознавство*. 2004. № 2. С. 74-79.

2. Гриценко В. И. Информационные технологии как метод познания в биологии и медицине. *Упр. системы и машины*. 2005. № 3. С. 12-15.
3. Іванишин В. В. Стратегія розвитку сільського господарства через призму впровадження сучасних технологій. *Техніка АПК*. 2005. № 10-11. С. 6.
4. Інформаційні технології в біології та медицині : курс лекцій / В. І. Гриценко та ін. Київ, 2007. 384 с.
5. Мушеник І.М., Бурлаков О.С. Методичні основи оцінки ефективності впровадження та використання інформаційно – комунікаційних технологій в управлінні підприємствами. *Інноваційна економіка*. 2017. № 5-6[69]. С 162-167.
6. Ясінецька І.А., Мушеник І.М. Інформаційні системи і технології в управлінні діяльністю підприємства. *Збірник наукових праць ЛОГОΣ*. 2020. №1.С 66-67.