

ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ МЕТОДІВ У БІОТЕХНОЛОГІЯХ І ХІМІЇ

Мельниченко О.В., Коваль О.О.

*Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»*

м. Київ, пр. Перемоги, 37, Україна

e-mail: oliamilton1@gmail.com

Біотехнологія як наука переживає початкові етапи формування. Уперше термін «біотехнологія» застосував угорський інженер Карл Ереки в 1917 р. Напевно, найбільш повним і правильним буде таке визначення біотехнології: це застосування наукових та інженерних принципів для переробки речовин органічної та неорганічної природи біологічними агентами з метою отримання різних цінних продуктів та послуг.

Біотехнології – це міждисциплінарна галузь науки, яка охоплює: біоінформатику, генетику, біохімію, фізіологію, молекулярну біологію та ін. Ця галузь науки постійно розвивається, тому з'являються нові імена науковців, праці яких визначають її розвиток. Багато учених використовували математичний апарат у біотехнологіях для моделювання та аналізу біологічних процесів.

Науки у вивченні природи просуваються від простого до складного, від вивчення структури об'єкта до дослідження його у динаміці. Так було і з екологією. Математичні методи застосовували для дослідження не всієї біосфери, а спочатку побудували модель окремої складової частини біосфери – популяції. Одним із перших теорію розробив італійський учений Віто Вольтерра 1926 р. Праця Вольтерра, за оцінкою фахівців, це, безумовно, теорія біологічних спільнот, побудована саме як математична теорія. Від цієї роботи почалася сучасна математична екологія. «Вольтеррівські моделі використовуються для дослідження нових проблем в екології (проблем стабільності біологічних спільнот, перетину екологічних ніш, формування трофічних рівнів тощо) – проблем, яких просто не було у 30-ті роки і які виникли завдяки розвитку екології в цілому». На кілька місяців Вольтерра випередив А. Лотка, тому в науку увійшло рівняння Лотка-Вольтерра, яке описує взаємовідносини між двома видами в системі типу «хижак-жертва», «паразит-хазяїн», «споживач-корм», тобто класичну систему типу «кролі-лисиці». Ця модель, до речі, добре працює у фізиці, хімії, синергетиці. [1]

Часто аналітики в задачах моделювання і аналізу складних паралельних і асинхронних систем звертаються до формальних систем, заснованих на

використанні математичного апарату мереж Петрі. Формальна частина теорії мереж Петрі, створена на початку 60-х років німецьким математиком Карлом Петрі. Вона містить велику кількість моделей, методів і засобів аналізу, має велику кількість застосувань практично у всіх галузях обчислювальної техніки.

Джеффри Хінтон – канадський комп'ютерний науковець та піонер у глибинному навчанні, який використовується в біоінформатиці для аналізу біологічних даних. Глибинне навчання – це підхід до машинного навчання, який заснований на нейромережах, що імітують структуру і функції мозку людини. Цей підхід використовується для розв'язання складних завдань у багатьох галузях, включаючи біоінформатику.

Френсіс Крік та Джеймс Уотсон під час своїх досліджень також використовували математичні методи для аналізу даних, що отримували з рентгенівської кристалографії, і на основі цих даних вони розробили модель подвійної спіралі ДНК. Ця модель відома як модель Уотсона-Кріка і показує, що ДНК складається із двох спіралеподібних сплетених ниток. Відкриття структури ДНК та розробка моделі подвійної спіралі були ключовими кроками у розумінні генетичної інформації та механізмів наслідування в живих організмах.

Георгій Заславський – український математик. Однією з головних наукових праць Заславського є «Методи математичної біофізики в аналізі динаміки біологічних систем», яку він написав разом зі своїми колегами та опублікував у 2007 р. Автори розглядають математичні методи, що дозволяють аналізувати динаміку біологічних систем з точки зору фізики та динамічних систем. Зокрема, Г.Заславський та його колеги застосовували методи теорії хаосу до вивчення різних біологічних процесів, таких як розвиток популяцій тварин, експресія генів та ін.

Наведемо декілька прикладів застосування математичних методів в біотехнології та хімії. [2, 3]

1. Дослідження промивання осаду.

Розглянемо послідовність промивання осаду з використанням кожного разу свіжої води. Початкова пульпа містить a кг води з x_0 кг розчиненої солі на 1 кг води. При кожному промиванні свіжа вода надходить у кількості b кг. Після перемішування розчину відстоюється та зливається, при чому в пульпі залишається a кг води. Якщо концентрація розчину після n -промивання дорівнює x_n , то

$$ax_0 = ax_1 + bx_1,$$

звідси:

$$x_1 = \left(\frac{b}{a+b}\right) x_0.$$

Концентрація розчину після n-промивання дорівнює:

$$x_n = \left(\frac{a}{a+b}\right)^n x_0.$$

Загальна кількість розчиненої солі, вилучена промивною водою, буде:

$$bx_1 + bx_2 + bx_3 + \dots + bx_n = \left[\frac{a}{a+b} + \left(\frac{a}{a+b}\right)^2 + \dots + \left(\frac{a}{a+b}\right)^n \right] bx_0.$$

Із збільшенням кількості промивання, тобто при $n \rightarrow \infty$, кількість солі в пульпі буде прямувати до нуля, а кількість вилученої солі буде прямувати до ax_0 , отже отримуємо рівняння:

$$ax_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a}{a+b}\right)^n,$$

де права частина рівняння є нескінченним рядом, який можна досліджувати на збіжність відомими математичними методами.

2. Розрахунок нітруючої суміші.

У розрахунках нітруючих сумішей зазвичай бувають заданими наступні значення: загальна кількість суміші, яка повинна бути приготовлена, її склад та склад всіх вихідних компонентів суміші; шуканими величинами є кількість вихідних компонентів, вхідних у склад суміші. В загальному випадку нітруюча суміш складається з трьох компонентів, у склад яких входить вода, азотна та сірчана кислоти. Введемо позначення:

у-кількість приготованої нітр. суміші;

с-вміст азотної кислоти в приготовленій суміші, %;

m-вміст сірчаної кислоти;

n-вміст води у приготовленій суміші, % ;

у_a-кількість компонента а, який витрачається на приготування суміші, кг;

l_a-вміст азотної кислоти в компоненті а, %;

m_a-вміст сірчаної кислоти в компоненті а, %;

n_a-вміст води в компоненті а, %;

у_b-кількість компонента b, для приготування суміші, кг;

l_b-вміст азотної кислоти в компоненті b, %;

Сума кількості всіх компонентів повинна дорівнювати кількості приготовленої суміші, тобто: $у_a + у_b + у_c = у$.

Зауважимо, що кількість азотної кислоти, яка буде перебувати у готовій суміші: $у_l = у_a * l_a + у_b * l_b + у_c * l_c$; кількість сірчаної кислоти, яка буде перебувати у готовій суміші: $у_m = у_a * m_a + у_b * m_b + у_c * m_c$; кількість води, яка буде перебувати у готовій суміші: $у_n = у_a * n_a + у_b * n_b + у_c * n_c$.

Звівши останні три рівняння в систему, розв'яжемо її методом Крамера, звідки отримаємо основний визначник системи:

$$(la - lb)(ma - mc) - (la - lc)(ma - mb).$$

Таким чином :

$$ya = y \frac{(lc - l)(mc - mb) - (lc - lb)(mc - m)}{(la - lb)(ma - mc) - (la - lc)(ma - mb)}, \text{ кг}$$

$$yb = y \frac{(lc - l)(ma - mc) - (la - lc)(ma - m)}{(la - lb)(ma - mc) - (la - lc)(ma - mb)}$$

$$yc = y \frac{(la - l)(mb - ma) - (lb - la)(ma - m)}{(la - lb)(ma - mc) - (la - lc)(ma - mb)},$$

(де *la=la; lb=lb; lc=lc; ma=ma; mb=mb; mc=mc.)

ЛІТЕРАТУРА

1. Історія біології з початку ХХ століття донині. М: Наука, 1975. 660 с.
2. Трохимчук, Н. Плюта, І. Логвиненко, Р. Сачук. Біотехнологія з основами екології. Навчальний посібник. 2019. 304 с.
3. Капрельянц, Л. В. Теоретичні основи біотехнології : навч. посіб. Харків. 2020. 291 с.