

ПРОГРАМНІ ОНЛАЙН ДОДАТКИ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗКУ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ ГРАФІЧНИМ МЕТОДОМ У ЗАВДАННЯХ БІОТЕХНОЛОГІЇ

Морозов О.В.

Науковий керівник: Нессонова М.М.

Національний фармацевтичний університет

alexmorozov.am57@gmail.com

Вступ. Комп'ютерне моделювання в багатьох джерелах визначається як процес конструювання моделі реального об'єкту чи системи і постановки обчислювальних експериментів на цій моделі з метою або зрозуміти і дослідити поведінку цієї системи, або оцінити ефективність різних стратегій її функціонування за допомогою реалізованих на комп'ютерах обчислювально-логічних алгоритмів. Тобто, процес комп'ютерного моделювання включає і конструювання моделі, і її застосування для вирішення поставленої задачі: аналізу, дослідження, оптимізації або синтезу (проектуювання) біотехнологічних процесів, апаратів і систем. Базою для побудови комп'ютерної моделі є математична модель досліджуваного об'єкту, процесу чи явища.

Математичне моделювання будь-якого біотехнологічного процесу, апарату чи системи базується на дослідженні кінетики біохімічних процесів (наприклад, росту клітинної маси біореагентів, біосинтезу в процесі росту і розвитку клітин цінних біотехнологічних продуктів, біотрансформації тощо). Кінетика біотехнологічних процесів вивчає закономірності зміни швидкості росту мікроорганізмів і біосинтезу продуктів метаболізму в залежності від поточних концентрацій субстратів, біомаси, продуктів метаболізму, температури і рН середовища. Найпростіша модель кінетики подається у вигляді диференціального рівняння: $\frac{dc}{dt} = \mu \cdot C$, де C – концентрація досліджуваного біореагенту, μ – питома швидкість росту біореагентів. В цій моделі питома швидкість росту біореагентів не постійна величина, а є функцією від концентрації лімітуючого чи стимулюючого субстрату $\mu = \mu(S)$. Ця функція може мати різний вигляд в залежності від штаму чи виду мікроорганізму або інших параметрів.

Мета дослідження. Метою даної роботи є дослідження моделей питомої швидкості росту біореагентів у вигляді нелінійних функцій графічними засобами вільних онлайн програмних продуктів, а також порівняльний аналіз цих програмних засобів.

Матеріали та методи. Для досягнення мети використані такі програмні засоби (вільні онлайн сервіси) для розв'язку нелінійних рівнянь і побудови графіків як SMath Studio, Desmos, Umath і YotX. Досліджувалися можливості

зазначених програм щодо побудови графіків і зручності застосування для розв'язку нелінійних рівнянь графічним методом на прикладах задач з використанням декількох нелінійних моделей питомої швидкості росту біореагентів: моделі Моно, моделі Мозера і моделі Андрюса.

Отримані результати. Модель Моно є найбільш відомою. Вона заснована на ферментативній кінетиці, що протікає в клітинах при біохімічних перетвореннях, і задається рівнянням:

$$\mu(S) = \frac{\mu_m \cdot S}{K_s + S}, \text{ де } \mu_m \text{ і } K_s \text{ – константи.}$$

Використання засобів комп'ютерних програм дозволяє не лише візуалізувати цю нелінійну залежність і дослідити вплив параметрів μ_m і K_s на питому швидкість зростання, але й давати відповіді на питання типу «яка потрібна кількість лімітуючого субстрату для досягнення необхідної питомої швидкості росту біореагентів?», тобто вирішувати нелінійні рівняння типу $\mu(S) = \mu_0$ графічним методом. Приклад розв'язку подібної задачі графічним методом засобами сервісу Umath показано на рис. 1.

Модель Мозера враховує сигмоїдальний характер залежності питомої швидкості росту біореагентів від кількості субстрату і задається функцією

$$\mu(S) = \mu_m \frac{S^K}{K_s + S^K}.$$

Тут K – новий, в порівнянні з рівнянням Моно, параметр, причому $K > 1$. Приклад графічного розв'язку задачі про визначення заданої питомої швидкості росту біореагентів, що відбувається за моделлю Мозера, засобами онлайн ресурсу Desmos показано на рис. 2.



Рис.1. Знаходження необхідної питомої швидкості росту біореагентів у моделі Моно графічним методом з використанням засобів онлайн ресурсу Umath

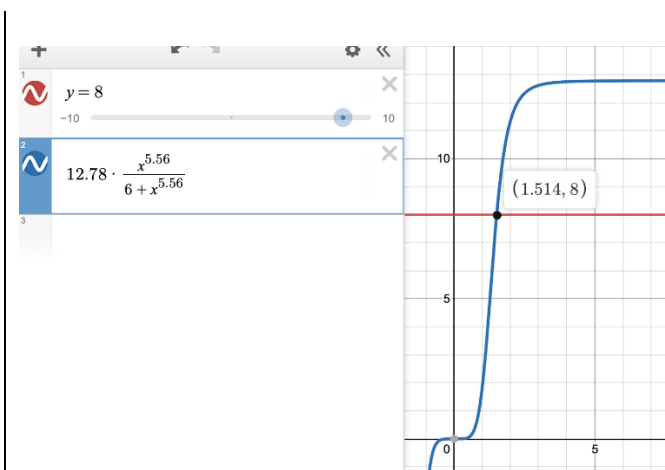


Рис.2. Знаходження необхідної питомої швидкості росту біореагентів у моделі Мозера графічним методом з використанням засобів онлайн ресурсу Desmos

Модель Андрюса враховує інгібування підвищеними концентраціями субстрату та описується рівнянням

$$\mu(S) = \mu_m \frac{S}{K_S + S + S^2/K_i}$$

Це рівняння відрізняється від рівняння Моно наявністю в знаменнику квадратичного члену S^2 з новим кінетичним параметром K_i . Візуалізація результатів вирішення задачі про знаходження необхідної питомої швидкості росту біореагентів у цій моделі засобами SMath Studio показана на рис. 3, засобами YotX – на рис. 4.

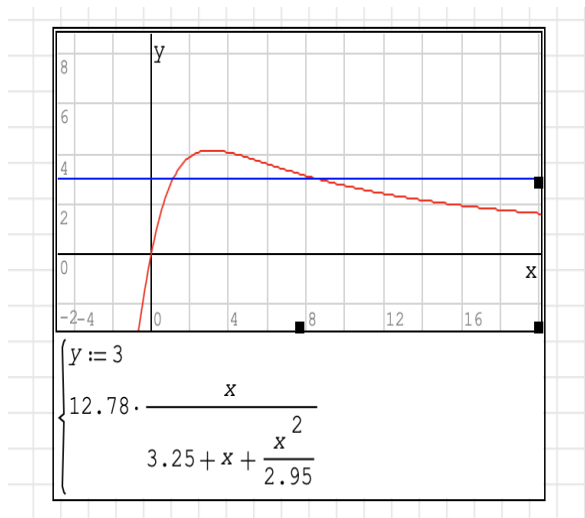


Рис. 3. Знаходження необхідної питомої швидкості росту біореагентів у моделі Андрюса графічним методом з використанням засобів SMath Studio

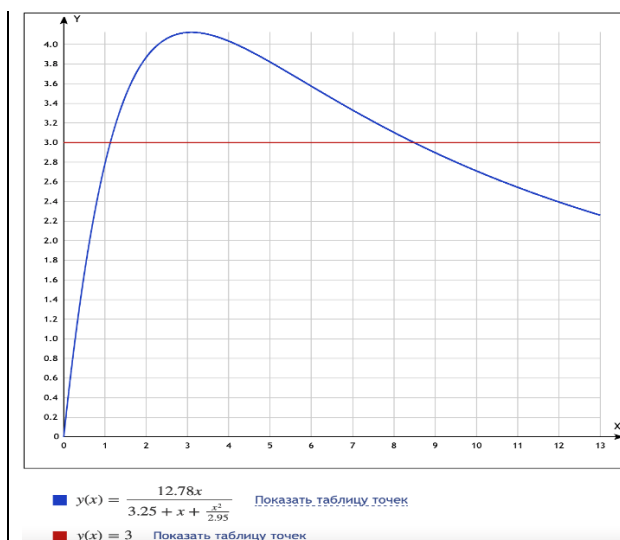


Рис. 4. Знаходження необхідної питомої швидкості росту біореагентів у моделі Андрюса графічним методом з використанням засобів онлайн ресурсу YotX

Висновки. Таким чином, в роботі на прикладі нелінійних моделей для питомої швидкості росту біореагентів розглянуто можливості вільних онлайн програмних засобів для побудови графіків функцій і досліджено доступні у них інструменти щодо графічного розв'язку нелінійних рівнянь. За результатами дослідження на нашу думку найбільш зручний інтерфейс має програма Desmos. Дана програма дає можливості легко дослідити потрібні функції, інформативно вказує перетин графіків та координати точок перетину, має багато вбудованих алгебраїчних функцій. Широкі можливості також мають програма SMathStudio та онлайн ресурс Yotx.ru, усі вони надають змогу побудувати та дослідити функцію. SMathStudio має апарат для вирішення подібних задач чисельно і без побудови графіків.