

УДК 519.876.5:577.1:612.12

**ВИКОРИСТАННЯ ЕЛЕМЕНТІВ  
СТАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ЗА ПОБУДОВИ  
МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ**

**Н. В. АРНАУТА**, кандидат фізико-математичних наук,

**О. В. АРНАУТА**, кандидат ветеринарних наук,

*Національний університет біоресурсів і природокористування України*

*E-mail: oarnauta@nubip.edu.ua*

***Анотація.** В даній роботі розглядається постановка задачі побудови математичної моделі біохімічних процесів із застосуванням елементів статичного моделювання, схема розрахунків, побудова рівняння регресії і аналіз отриманих результатів. На даний час оволодіння сучасними методами збирання, обробки й аналізу статичної інформації – невід’ємний елемент підготовки висококваліфікованих спеціалістів. В статичному моделюванні процесів найчастіше доводиться мати справу з кореляцією ознак, коли зв’язок між ними знаходиться тільки на основі дослідження масових явищ. Кореляційний метод включає кількісну оцінку між статичними ознаками, що характеризують досліджувані явища взаємних залежностей. Напрям та форму зв’язку встановлюють за допомогою статичних групувань, а також графіків, побудованих у системі координат на основі емпіричних даних. Рівняння, за допомогою яких визначають статичний зв’язок між корелюючими величинами, називають рівняння регресії. Практично ця задача збігається із задачею підбору емпіричних формул за експериментальними даними і найчастіше розв’язується методом найменших квадратів. Друга задача кореляційного аналізу полягає в тому, щоб оцінити, настільки тісною (сильною) є кореляційна залежність між випадковими величинами. Побудовані рівняння регресії дозволяють прогнозувати зміни, які відбуваються в даній біохімічній системі з великою ступеню вірогідності. Наведено розв’язок конкретної конкретної задачі і аналіз отриманих результатів*

***Ключові слова:** біохімічні процеси, математичне моделювання, статичне моделювання*

**Актуальність.** Немає сьогодні такої галузі знань, де б не застосовувалися досягнення математики. Математизація великої кількості прикладних та фундаментальних наук дозволила моделювати поведінку частин системи, що розглядається, їх взаємодію з врахуванням факторів, що впливають на цю систему. Моделювання дозволяє значно спростити планування та виконання експериментів [2, 3].

Одна із задач статичного моделювання – виявити кількісну міру впливу того чи іншого фактора (або їх комплексу) на результати. В статичному моделюванні процесів найчастіше доводиться мати справу з кореляцією ознак, коли зв'язок між ними знаходиться тільки на основі дослідження масових явищ. Водночас закономірність зв'язку між ознаками проявляється як тенденція, що порушується впливом множини випадкових процесів. В усіх випадках за достатньої кількості спостережень вдається виявити закономірність, яка у середньому характеризує параметри взаємозв'язку [2].

Напрямок та форма зв'язку і вибір типу математичного рівняння найбільш чітко визначають взаємозалежність факторної та результативної ознак. Напрямок та форму зв'язку встановлюють за допомогою статичних групувань, а також графіків, побудованих у системі прямокутних координат на основі емпіричних даних [6].

**Мета досліджень** – побудова математичної моделі біохімічних процесів із застосуванням елементів статичного моделювання, рівняння регресії і аналіз отриманих результатів.

**Матеріали і методи дослідження.** Розглянемо схему розрахунків. В першу чергу треба в'яснити, яка загальна форма залежності  $y$  від  $x$ . Тут доцільним прийомом є побудова графіка. На графіку вдається візуально виявити передбачувану форму зв'язку. Стандартні програми аналізу регресій, що є майже в будь-якому програмно-математичному забезпеченні сучасних ЕОМ дозволяють підібрати найкращу для даного випадку форму зв'язку. На практиці найчастіше вивчення починають з розгляду та оцінки лінійного зв'язку як найбільш простого для інтерпретації параметрів. Тому форму зв'язку виразимо рівнянням:

$$y = ax + b,$$

де:  $y$  – значення результативної ознаки,  $x$  – значення факторної ознаки,  $a$ ,  $b$  – шукані параметри [2].

За прямого зв'язку між корелюючими ознаками коефіцієнт регресії  $a$  матиме додатне значення, за зворотного – від'ємне.

Якби значення результативної ознаки  $y$  змінювалися строго пропорційно змінам факторної ознаки  $x$ , то очікувані значення  $y_i$  можливо було б точно обчислити за заданими значеннями  $x_i$ . В реальних умовах спостережені значення  $x_i$  будуть відрізнятися від очікуваних значень  $\bar{y}_i$  на величину  $\varepsilon_i$ , тобто одержуємо деяке розподілення відхилень:

$$\varepsilon_i = y_i - \bar{y}_i.$$

Чим менша ця різниця, тим ясніше проступає закономірність зв'язку між ознаками. Тому під час визначення параметрів слід знайти таку форму зв'язку, яка б забезпечила мінімум відхилень. А оскільки відхилення мають різні знаки, то ставиться вимога забезпечити мінімум суми квадратів відхилень:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2 \rightarrow \min,$$

де  $n$  – кількість досліджуваних значень,  $n > 2$ .

Метод, в якому невідомі параметри вибираються, щоб задовольнити поставленим вимогам, називають методом найменших квадратів.

Якщо для величини  $\varepsilon$  застосувати теорію екстремумів, то отримаємо необхідні умови для визначення невідомих параметрів  $a$  і  $b$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial a} &= 0, \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial b} &= 0. \end{aligned}$$

Отримані рівняння називають нормальними рівняннями (кількість нормальних рівнянь має дорівнювати кількості параметрів).

Проведемо визначення параметрів рівняння лінійної залежності  $a$ ,  $b$  методом найменших квадратів. Щоб визначити невідомі параметри рівняння  $y=ax+b$  необхідно побудувати систему з двох рівнянь та вирішити її стосовно невідомих  $a$ ,  $b$  [2-4, 7].

Система нормальних рівнянь буде мати такий вигляд:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n y_i &= nb + a \sum_{i=1}^n x_i, \\ \sum_{i=1}^n y_i x_i &= b \sum_{i=1}^n x_i + a \sum_{i=1}^n x_i^2.\end{aligned}\quad (1)$$

Розв'язок системи (1) має вигляд:

$$\begin{aligned}a &= \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}, \\ b &= \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n y_i - a \sum_{i=1}^n x_i \right).\end{aligned}$$

Важливим завданням аналізу рівняння регресії є визначення кореляційного зв'язку між результатом і закладеного в модель фактора. Кількісним показником кореляції прямолінійного зв'язку результату з одним фактором є коефіцієнт парної кореляції, який обчислюють за формулою:

$$\begin{aligned}r &= \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\sigma_x \sigma_y}, \\ \overline{xy} &= \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{n}, \quad \bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}, \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}, \\ \sigma_x &= \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} - \bar{x}^2}, \quad \sigma_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n y_i^2}{n} - \bar{y}^2},\end{aligned}$$

де:  $r$  - лінійний коефіцієнт кореляції;  $\sigma_x$  - середнє квадратичне відхилення факторної ознаки;  $\sigma_y$  - середнє квадратичне відхилення результативної ознаки.

Абсолютна величина коефіцієнта кореляції  $|r| \leq 1$ . Чим ближче коефіцієнт кореляції до  $\pm 1$ , тим тісніший зв'язок між  $y$  та  $x$  і, навпаки, чим ближче коефіцієнт кореляції до 0, тим слабший зв'язок між результативною та факторною ознаками. Коефіцієнт кореляції має такий самий знак, як і коефіцієнт регресії у рівнянні зв'язку [2-5, 7].

**Результати досліджень та їх обговорення.** Тепер розв'яжемо систему рівнянь (1) стосовно невідомих параметрів  $a$ ,  $b$  на прикладі змін концентрації

глюкози в плазмі консервованої крові биків, дослідні зразки якої консервувались бікарбонат-вуглекислотним середовищем, а контрольні – глюкозо-цитратним консервантом «Глюгіцир» [6; 8].

Як видно із табл. 1, в день відбору крові (перший день досліджень), рівень глюкози в контрольних та дослідних зразках був однаковим і становив відповідно:  $4,9 \pm 0,18$  ммоль/л та  $4,7 \pm 0,07$  ммоль/л.

У процесі зберігання вміст її поступово знижувався. На десяту добу між контролем та дослідом спостерігали достовірну різницю її середніх показників: відповідно  $3,7 \pm 0,13$  ммоль/л (контроль) та  $4,5 \pm 0,05$  ммоль/л (дослід); ( $p < 0,05$ ). По відношенню до вихідних даних, рівень глюкози в контрольних зразках знизився на 24,4 %, тоді, як в дослідних лише на 4,3 %. Таку тенденцію в падінні рівня глюкози спостерігали упродовж всього періоду зберігання консервованої крові. В кінці досліду, (тридцятьа доба зберігання) кількість глюкози в контрольних пробах знизилась на 89,9 %, порівняно з першим днем, тоді як в дослідних на лише 55,3 % (табл. 1).

Ці дані свідчать про те, що інтенсивність утилізації глюкози в крові, яка зберігалась у модифікованому вуглекислотою консерванті, значно менша, порівняно з контролем, що вказує на гальмування гліколізу, як основного енергетичного процесу в еритроцитах.

**1. Концентрація глюкози в плазмі консервованої крові биків при її зберігання за умов штучного вуглекислотного гіпобіозу, ммоль/л, ( $M \pm m$ ,  $n = 5$ )**

Групи зразків крові	Термін зберігання, діб						
	1	5	10	15	20	25	30
Контрольна	4,9 $\pm 0,18$	4,6 $\pm 0,04$	3,7 $\pm 0,13$	3,1 $\pm 0,07$	2,4 $\pm 0,02$	1,4 $\pm 0,05$	0,5 $\pm 0,09$
Дослідна	4,7 $\pm 0,07$	4,6 $\pm 0,11$	4,5 $\pm 0,05^*$	4,1 $\pm 0,33^*$	3,4 $\pm 0,09^*$	2,9 $\pm 0,23^*$	2,1 $\pm 0,08^*$

Примітка: \*  $p < 0,05$  порівняно з контрольними зразками.

Знаходимо рівняння зв'язку між концентрацією глюкози в плазмі консервованої крові биків при її зберіганні за умов штучного вуглекислотного гіпобіозу та терміну зберігання, діб.

Обчислюємо суми, які входять у формули (1) – (2). Для зручності результати всіх обчислень розміщуємо в наступні таблиці 2 і 3.

**2. Вихідні і розрахункові дані для обчислення рівняння зв'язку між концентрацією глюкози в плазмі консервованої крові биків від терміну зберігання (контрольна група)**

	$x_i$	$y_i$	$x_i y_i$	$x_i^2$	$y_i^2$
	1	4,9	4,9	1	24,01
	5	4,6	23	25	21,16
	10	3,7	37	100	13,69
	15	3,1	46,5	225	9,61
	20	2,4	48	400	5,76
	25	1,4	35	625	1,96
	30	0,5	15	900	0,25
$\Sigma :$	106	20,6	209,4	2276	76,44

**3. Вихідні і розрахункові дані для обчислення рівняння зв'язку між концентрацією глюкози в плазмі консервованої крові биків від терміну зберігання (дослідна група)**

	$x_i$	$y_i$	$x_i y_i$	$x_i^2$	$y_i^2$
	1	4,7	4,7	1	22,09
	5	4,6	23	25	21,16
	10	4,5	45	100	20,25
	15	4,1	61,5	225	16,81
	20	3,4	68	400	11,56
	25	2,9	72,5	625	8,41
	30	2,1	63	900	4,41
$\Sigma :$	106	20,6	337,7	2276	104,69

Система (1) для контрольної групи має вигляд:

$$\begin{cases} 106a + 7b = 20,6, \\ 2276a + 106b = 209,4, \end{cases}$$

її розв'язок

$$a \approx -0,153,$$

$$b \approx 5,257,$$

тому рівняння лінійного зв'язку матимемо вигляд:

$$\tilde{y} = -0,153x + 5,257.$$

Аналогічно складаємо систему (1) для дослідної групи:

$$\begin{cases} 106a + 7b = 26,3, \\ 2276a + 106b = 337,7, \end{cases}$$

знаходимо її розв'язок:

$$a \approx -0,09,$$

$$b \approx 5,12,$$

отже, рівняння лінійного зв'язку матимемо вигляд:

$$\tilde{y} = -0,09x + 5,12.$$

Отримані рівняння описують характер зв'язку між ознаками і називаються рівняннями регресії. Рівняння регресії використовують для прогнозування очікуваних рівнів результативних ознак при встановлених значеннях факторних ознак. Очікувані значення концентрації глюкози в плазмі консервованої крові биків, обчислені за допомогою рівняння зв'язку, будуть такі (табл. 4):

**4. Очікувані значення концентрації глюкози в плазмі консервованої крові биків при її зберіганні за умов штучного вуглекислотного гіпобіозу, ммоль/л, ( $M \pm m$ ,  $n = 5$ )**

Групи зразків крові	Термін зберігання, дів						
	1	5	10	15	20	25	30
Контрольна	5,1	4,5	3,7	3,0	2,2	1,4	0,7
Дослідна	5,0	4,7	4,2	3,8	3,3	2,9	2,4

На підставі даних таблиці 2 обчислимо коефіцієнт кореляційної залежності концентрації глюкози в плазмі консервованої крові биків від терміну зберігання (контрольна група).

Обчислюємо всі потрібні для розрахунків величини:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= 15,14, \quad \bar{x}^2 = 229,22, \quad \overline{x^2} = 325,143, \\ \bar{y} &= 2,943, \quad \bar{y}^2 = 8,661, \quad \overline{xy} = 29,914, \end{aligned}$$

отже,

$$r = \frac{29,914 - 15,14 \cdot 2,943}{\sqrt{325,143 - 229,22} \cdot \sqrt{10,92 - 8,661}} = 0,995.$$

Аналогічно на підставі даних таблиці 3 обчислимо коефіцієнт кореляційної залежності концентрацією глюкози в плазмі консервованої крові биків від терміну зберігання (дослідна група):

Обчислюємо всі потрібні для розрахунків величини:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= 15,14, \quad \bar{x}^2 = 229,22, \quad \overline{x^2} = 325,143, \\ \bar{y} &= 3,757, \quad \bar{y}^2 = 14,115, \quad \overline{xy} = 48,243,\end{aligned}$$

отже,

$$r = \frac{48,243 - 15,14 \cdot 3,757}{\sqrt{325,143 - 229,22} \cdot \sqrt{14,956 - 14,115}} = 0,959.$$

Коефіцієнт кореляції показує, що між концентрацією глюкози в плазмі консервованої крові биків і терміну зберігання для обох груп існує тісний зв'язок.

### Список літератури

1. Антонов Ю. Г. Моделирование биологических систем: Справочник / Ю. Г. Антонов – К.:Наук. думка, 1977. – 260 с.
2. Вергунова І. М. Основи математичного моделювання для аналізу та прогнозу агрономічних процесів / І. М. Вергунова–К.: «НОРА-ПРІНТ», 2000. – 145 с.
3. Горковий В. К. Математична статистика / В. К. Горковий, В. В. Ярова. – К.: ВД «Професіонал», 2004, - 384 с.
4. Ермаков С. М. Курс статического моделирования / С. М. Ермаков, Г. А. Михайлов. – М.: «Наука», 1977. – 350 с.
5. Методы математической биологии в 5 кн.: Кн.2 «Методы синтеза алгебраических и вероятностных моделей биологических систем». – К.: «Вища школа», 1981. – 215 с.
6. Патент 65175 А Україна, А61К31/01. Бікарбонат-вуглекислотний розчин для консервування донорської крові / Мельничук С.Д., Арнаута О.В., Мельничук Д.О. Національний аграрний університет.
7. Суліма І. М. Вища математика. Теорія ймовірностей. Математична статистика. / І. М. Суліма, В. М. Яковенко. – К.: НАУ, 2004. – 238 с.
8. Типовий технологічний регламент виготовлення розчину «Глюгіцир» для консервування донорської крові. – К.: 1997. – 44 с.



## Reference

1. Antonov Yu. G. (1977). Modelirovanie biologicheskikh sistem. Spravochnik. [Modelirovanie of the biologicheskikh systems. Spravochnik] Kyiv «Nauk. dumka», 260.
2. Vergunova I.M. (2000). Osnovy matematicheskogo modelyuvannya dlya analizu ta prognozy agronomichnykh protsesiv. [Bases of mathematical design are for an analysis and prognosis of agronomical processes] Kyiv «NORA-PRINT», 145.
3. Gorkovyi V.K., Yarova V.V. (2004). Matematychna ststistika [Mathematical statistics] Kyiv «PROFESIONAL», 384.
4. Ermakov S.M., Mihailov G.A. (1977). Kurs staticheskogo modelirovaniya. [Course of staticheskogo modelirovaniya]. Moskva: «Nauka», 350.
5. Metody matematicheskoi biologii v 5 kn.: Kn.2 «Metody sinteza algebraichnykh I veroyastnochnykh modelei biologicheskikh sistem» (1981) [Metody of matematicheskoy biologii in 5 b.: B. 2 «Metody of sinteza algebraicheskikh I of veroyastnostnykh models of the biologicheskikh systems»]. Kyiv, «Vyshcha shkola», 215.
6. Melnychuk D.O., Arnauta O.V., Melnychuk S.D. Sodium-bicarbonate solution for preservation of blood Бікарбонат-вуглекислотний розчин для консервування донорської крові Patent of Ukraine 65175 A, A61K31/01. National Agrarian University.
7. Sylima I.M., Yakovenko B.M. (2004) Vyshcha matamatyka. Teoria imovirnostei. Matematychna statistika. [Higher mathematics. Theory of chances. Mathematical statistics]. Kyiv, «NAU», 238.
8. Typovyi tehnologichniy reglament vugotovlennya rozchynu «Glyutsr» dlya kontservuvannya donorckoi krovi (1997). [Typical technological regulation of making of solution of «Glyugicir» is for canning of donor blood]. Kyiv, 44.

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ СТАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ПОСТРОЕНИИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БИОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Н. В. Арнаута, О. В. Арнаута

*Аннотация.* В данной работе рассматривается постановка задачи построения математической модели биохимических процессов с использованием элементов статического моделирования, схема расчетов, построение уравнения регрессии и анализ полученных результатов. На данное время освоение современными методами сбора, обработки и анализу статической информации – неотъемлемый элемент подготовки высококвалифицированных специалистов. В статическом моделировании процессов частое приходится иметь дело с корреляцией признаков, когда связь между ними находят только на основе исследования массовых явлений. Корреляционный метод включает количественную оценку между статическими признаками, которые характеризуют исследованные явления взаимных зависимостей. Направление и форма связи устанавливается с помощью

графиков, построенных в системе координат на основе эмпирических данных. Уравнения, с помощью которых определяют статическую связь между корреляционными величинами, называют уравнения регрессии. Вторая задача корреляционного анализу лежит в том, чтобы оценить, насколько сильна корреляционная зависимость между случайными величинами. Построенные уравнения регрессии позволяют прогнозировать изменения, что происходят в данной биохимической системе с высокой степенью вероятности. Приведено решение конкретной задачи и анализ полученных результатов.

**Ключевые слова:** биохимические процессы, математическое моделирование, статическое моделирование

## **USE OF ELEMENTS STATIC MODELING AT CONSTRUCTION OF MATHEMATICAL MODEL OF BIOCHEMICAL PROCESSES**

**N. V. Arnauta, O. V. Arnauta**

***Abstract.** A problem of construction of mathematical model of biochemical processes is considered. Elements of static modeling is used for construction of the mathematical model. On this time static information modern methods are important element of preparation of highly skilled specialists. The static modeling is based on the correlation method. It is used for construction of the equation of regression and analysis of the got result. A connection between signs is only on the basis of research of the mass phenomena. Numerical examples are given.*

**Keywords:** biochemical processes, mathematical modeling, static modeling