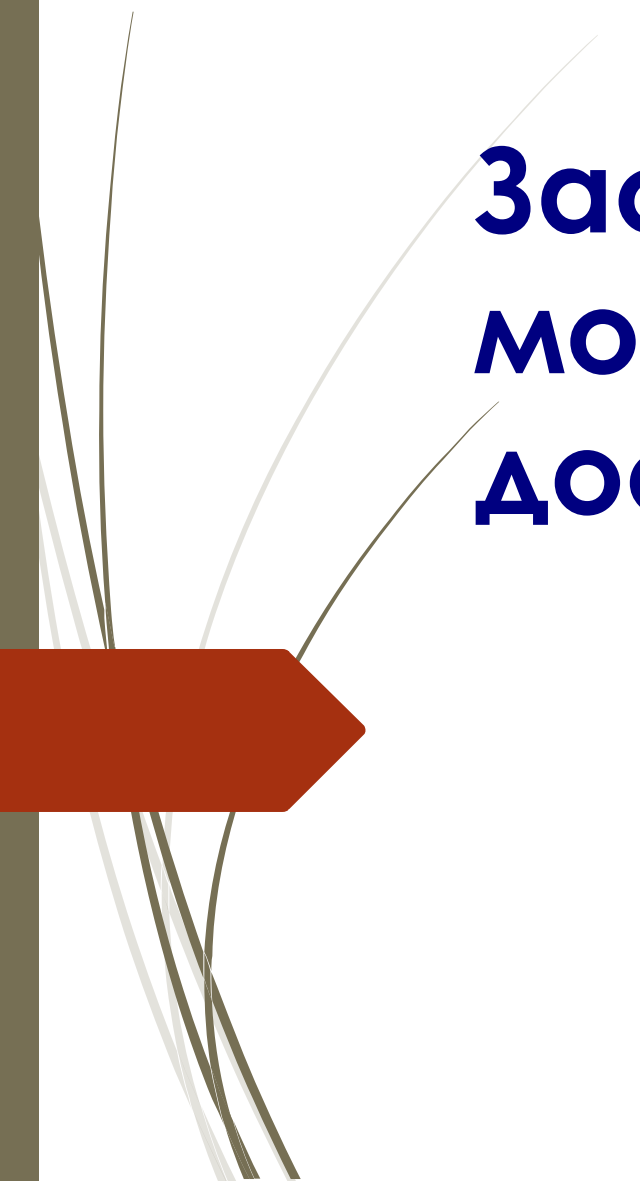




Застосування комп'ютерного моделювання в біологічних дослідженнях

Л.Д.Коровіна

Основні методи молекулярного моделювання

1. Структурне моделювання

Визначення просторової структури молекули, включаючи малі молекулярні сполуки та макромолекули, такі як білки та нуклеїнові кислоти.

Використання рентгенівської кристалографії, ядерного магнітного резонансу (ЯМР) та комп'ютерного моделювання для побудови структурних моделей. Програми, такі як PyMOL та Chimera, використовують для візуалізації та аналізу структурних даних.

2. Молекулярна динаміка: Цей метод дозволяє вивчити рух молекули в часі, моделюючи їх взаємодію на основі фізичних законів. Він використовується для дослідження стабільності молекулярних комплексів та динаміки біологічних процесів, вивчення змін у структурі білків під час їх функціонування.

3. Моделювання взаємодій

Дослідження взаємодії між білками, нуклеїновими кислотами та іншими молекулами, що є критично важливим для розуміння біохімічних процесів. Використання методів, таких як Docking, для прогнозування, як молекули взаємодіють одна з одною.

4. Квантово-механічні методи: Використовуються для точного розрахунку електронних структур молекул. Ці методи, такі як теорія функціональної густини (DFT), дозволяють отримати інформацію про енергетичні рівні та реакційну здатність молекули.

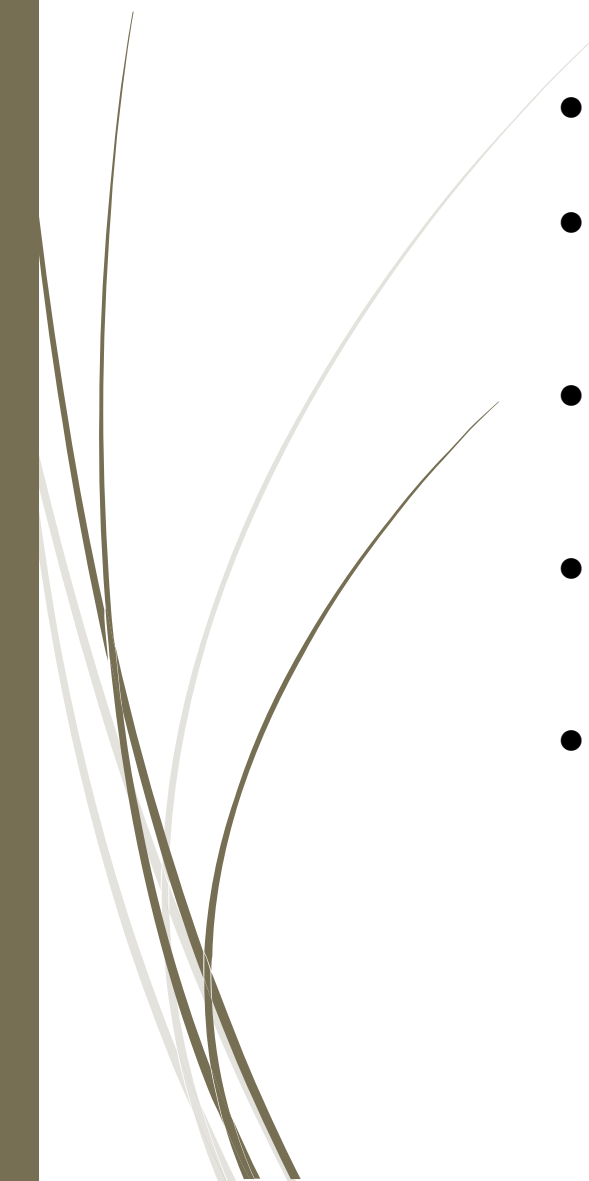
5. Статичне моделювання: Застосовується для побудови моделей молекул на основі їх геометрії. Це включає рентгенівську кристалографію та ядерний магнітний резонанс (ЯМР), які надають інформацію про структуру молекули.

6. Скринінг лігандів: Метод, який використовується для пошуку використовуваних лікарських засобів шляхом моделювання їх взаємодії з біологічними сумішами, такими як білки або рецептори.

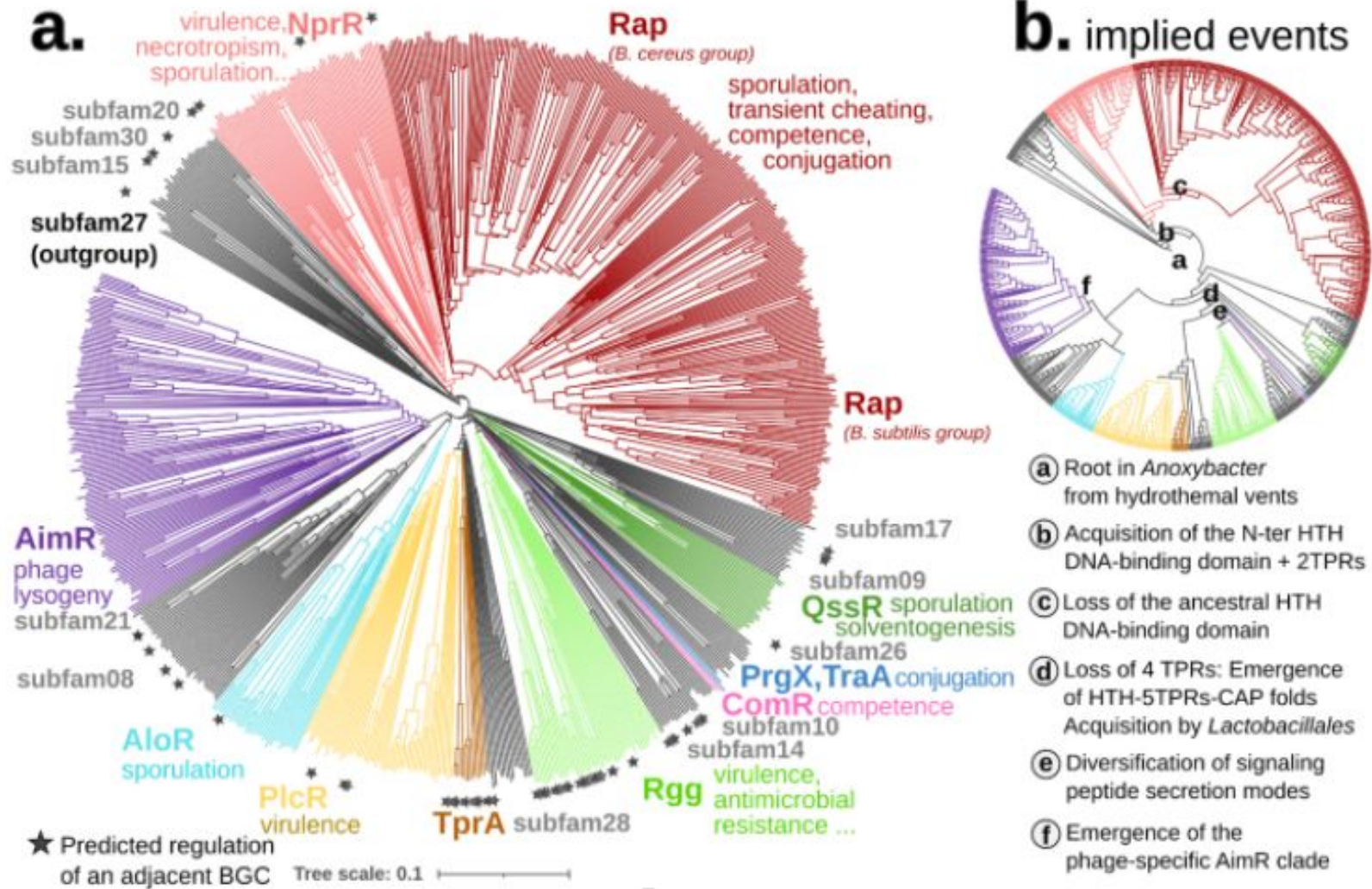
Комп'ютерне моделювання біомолекул, таких як білки та нуклеїнові кислоти, є виробничим напрямком у молекулярній біології та біохімії. Це дозволяє досліджувати структуру, функції та взаємодію цих молекул на атомному рівні.



Застосування комп'ютерного молекулярного моделювання

- **Дослідження білків**: Моделювання структури білків розуміє їх функції, механізми дії та взаємодії з лігандами.
 - **Вивчення метаболічних шляхів**: Моделі можуть бути використані для аналізу складних біохімічних шляхів та їх регуляції, що є місцем для розуміння хвороби та розробки терапії.
 - **Вивчення хвороби**: Моделі можуть використовуватися для розуміння механізмів хвороб, пов'язаних з білками, таких як нейродегенеративні захворювання.
 - **Розробка лікарських засобів**: Комп'ютерне моделювання дозволяє прогнозувати, як нові молекули можуть взаємодіяти з біологічними мішенями, що прискорює процес відкриття нових ліків.
 - **Синтез білків**: Моделювання при створенні нових білків з бажаними властивостями, що може бути корисним у біотехнології.
- 

Філогенетика прогнозованих ШІ структур протеїнів





Сучасні технології

Серед сучасних технологій, які використовують для комп'ютерного моделювання біомолекул, можна виділити:

AlphaFold: Програмне забезпечення, розроблене для передбачення тривимірної структури білків на основі їх амінокислотної складності, що використовує штучний інтелект для розрахунків.

GROMACS: Програмне забезпечення молекулярної динаміки, яке дозволяє проводити моделювання великих систем біомолекул.

CHARMM: Програма для моделювання молекулярної динаміки, що спеціалізується на біомолекулах, включаючи білки та нуклеїнові кислоти.



Переваги комп'ютерного молекулярного моделювання

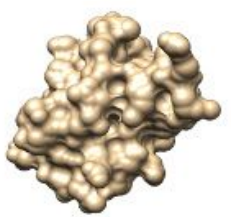
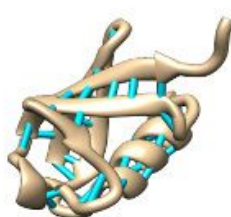
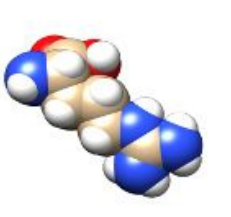
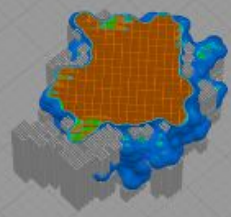
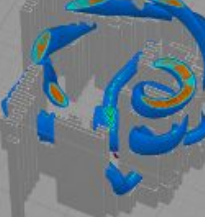
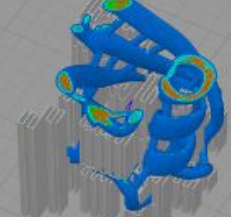
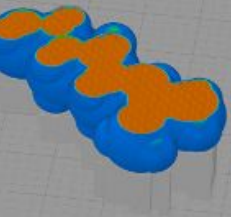
Економія ресурсів : Зменшує потребу в дорогих експериментах, дозволяючи проводити додаткові дослідження віртуально.

Швидкість і ефективність : Дозволяє швидко тестувати багато гіпотез та варіантів, що прискорює наукові дослідження.

Безпечність : Дослідження можуть проводитися без ризику для живих організмів, що важливо для етики в науці

3D друк біомолекулярних моделей для досліджень і педагогіки

Фізичні моделі біомолекул можуть полегшити розуміння їхньої структури та функції для дослідника, допомогти у спілкуванні між дослідниками та слугувати навчальним інструментом у педагогічній діяльності. Побудова фізичних тривимірних (3D) моделей біомолекул може сприяти вивченню взаємозв'язку структура-функція.

	Surface	Thickened ribbon	Hydrogen Bonds	Spheres
Chimera				
Slicer				
Printed model				

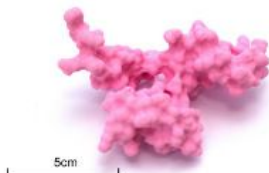
Візуальне представлення різних моделей на різних етапах підготовки.
Верхній ряд: Загальний вигляд двох моделей (убіквітин (PDB 1UBQ) і аргінін), візуалізовані за допомогою програми Chimera.
Середній ряд: Друк. Траекторія генерується з моделей Chimera STL.
Нижній ряд: Фінальні відбитки убіквітину і аргініну.

3D друк біомолекулярних моделей для досліджень і педагогіки

A Histone H3, 'ribbons'



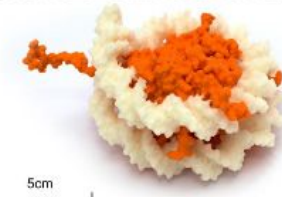
B Histone H3, 'surface'



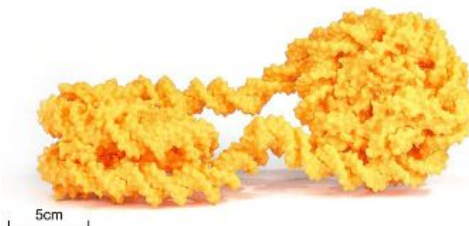
C Histone octamer, 'surface'



D Histone octamer/flexible DNA



E Dinucleosome, 'surface'

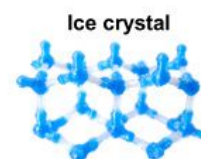


F Stacked dinucleosomes

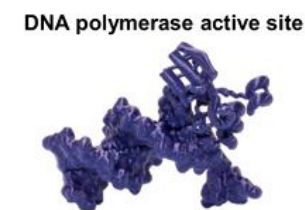
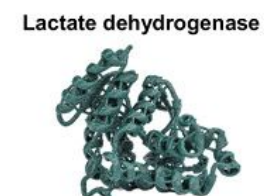
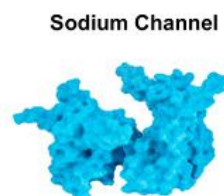


Моделі нуклеосом

A Atom representations

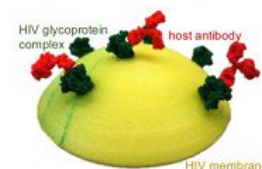


B Molecular representations

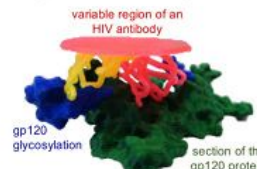


C Composite models of complexes

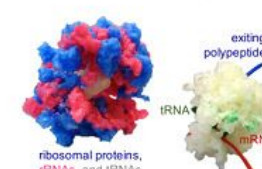
HIV surface bound by antibody



HIV gp120 bound by antibody



Ribosomal complex



Різні моделі



Методи молекулярної динаміки

1. Класична молекулярна динаміка

Цей метод базується на класичних законах фізики, зокрема на рівнях Ньютона, і використовується для моделювання великих систем молекул. Він дозволяє досліджувати динаміку молекули, їх взаємодію та зміни в структурі. Програми для молекулярної динаміки, такі як **GROMACS**, **AMBER** та **NAMD**, можуть досліджувати динаміку білків, нуклеїнових кислот та їх взаємодії.

2. Квантово-механічна молекулярна динаміка

Цей підхід по молекулярній динаміці з квантово-механічними обчисленнями. Він дозволяє отримати електронні ефекти, важливі для точного моделювання реакцій і взаємодії на малих масштабах. Квантово-механічні методи, як така теорія функціональної густини (DFT), використовуються для точного моделювання електронних структур молекул. Програми, такі як **Gaussian** та **ORCA**, можуть проводити таке обчислення.

3. Стандартна молекулярна динаміка

Цей метод використовує стандартні параметри для опису взаємодії між атомами, що дозволяє швидко провести моделювання великих систем. Він часто використовується для початкового аналізу.

4. Симуляції стикування (docking)

Ці методи використовують для прогнозування взаємодії між молекулами, такими як білки та ліганди. Програми, такі як **AutoDock** і **Vina**, дозволяють моделювати зв'язування молекул і оцінювати їх помітну активність.



Методи молекулярної динаміки

5 . Симуляції з обмеженнями

Ці методи дозволяють накладати обмеження на рух атомів або молекул, що можуть бути корисними для вивчення конкретних біологічних процесів, таких як конформаційні зміни в білках.

6. Системи моделювання біологічних процесів

Програмне забезпечення, таке як **VCell** та **CellDesigner**, дозволяє моделювати складні біологічні системи, включаючи метаболічні шляхи та сигнальні каскади.

7 . Моделювання з варіацією температури та тиску

Ці методи дозволяють моделювати умови, які наближають до реальних, шляхом зміни температури та тиску в системі, що дозволяє досліджувати термодинамічні властивості молекули.

8 . Симуляції з використанням потенціалів

Використання різних потенціалів (наприклад, потенціалів Леннарда-Джонса або Кулона) для опису взаємодій між атомами, що дозволяє моделювати специфічні системи з високою точністю.

9 . Гібридні методи

Ці методи поєднують різні класичні підходи, наприклад, молекулярну динаміку з квантово-механічними обчисленнями, для досягнення більшої точності в моделюванні складних систем.

10 . Візуалізація та анімація

Програми, такі як **Blender**, **Chimera** та **VMD**, можуть створювати реалістичні візуалізації та анімації біомолекул, які допомагають у навчанні та дослідженнях.



Алгоритми, що використовують для моделювання взаємодії між біомолекулами

Молекулярний докінг (Molecular Docking)

Молекулярний докінг - це алгоритм, який прогнозує орієнтацію однієї молекули відносно іншої, коли вони зв'язуються одна з одною, щоб сформувати стабільний комплекс. Він широко застосовується для вивчення взаємодій ліганд-рецепторів, наприклад, між лікарськими препаратами та їх біологічними мішенями..

Молекулярна динаміка (Molecular Dynamics)

Молекулярна динаміка - це метод, який дозволяє моделювати рух атомів і молекул у часі, використовуючи класичні фізичні закони. Він використовується для вивчення динаміки біомолекул та їх взаємодії в реальному часі.

Квантово-механічні методи

Квантово-механічні методи, як така теорія функціональної густини (DFT), використані для точного моделювання електронних структур молекул. Вони втратили квантові ефекти, що важливо для розуміння реакційної здатності та взаємодії на атомному рівні.

Метод Монте-Карло (Monte Carlo Method)

Метод Монте-Карло - це стохастичний алгоритм, який використовує випадкові числа для вирішення математичних задач. У біомолекулярному моделюванні він використовується для генерації ансамблів конформацій молекул та оцінки їх термодинамічних властивостей..

Методи машинного навчання (Machine Learning)

Методи машинного навчання, такі як нейронні мережі та методи глибокого навчання, використовуються для прогнозування структури білків та їх взаємодії на основі великих наборів даних. Вони можуть виявити складні закономірності в даних, які важко помітити вручну



Програми для моделювання біологічних систем, які найкраще підходять для дослідження взаємодії білків та ДНК

1. PyMOL

PyMOL — це потужне програмне забезпечення для візуалізації молекул, яке дозволяє досліджувати структуру білків та нуклеїнових кислот. Воно підтримує різноманітні формати файлів і дозволяє створювати високоякісні 3Dвізуалізації.

2. Chimera

Chimera — це ще одне популярне програмне забезпечення для візуалізації та аналізу біомолекул. Воно дозволяє моделювати взаємодію між білками та ДНК, а також аналізувати їх структуру.

3. GROMACS

GROMACS — це програма для молекулярної динаміки, яка дозволяє проводити симуляцію білків та нуклеїнових кислот. Вона особливо корисна для дослідження динаміки молекул і їх взаємодії в реальному часі.

4. NAMD

NAMD — це ще один потужний інструмент для молекулярної динаміки, який підтримує паралельні обчислення. Він дозволяє моделювати великі системи, включаючи білки та ДНК.

5. AutoDock

AutoDock — це програмне забезпечення для молекулярного докінгу, яке використовується для прогнозування взаємодії між білками та лігандами, включаючи ДНК. Це дозволяє досліджувати, як молекули зв'язуються одна з одною.

6. VCell (віртуальна клітина)

VCell — це система для моделювання клітинних процесів, яка дозволяє досліджувати динаміку біомолекул, включаючи білки та ДНК, у контексті клітинних систем.

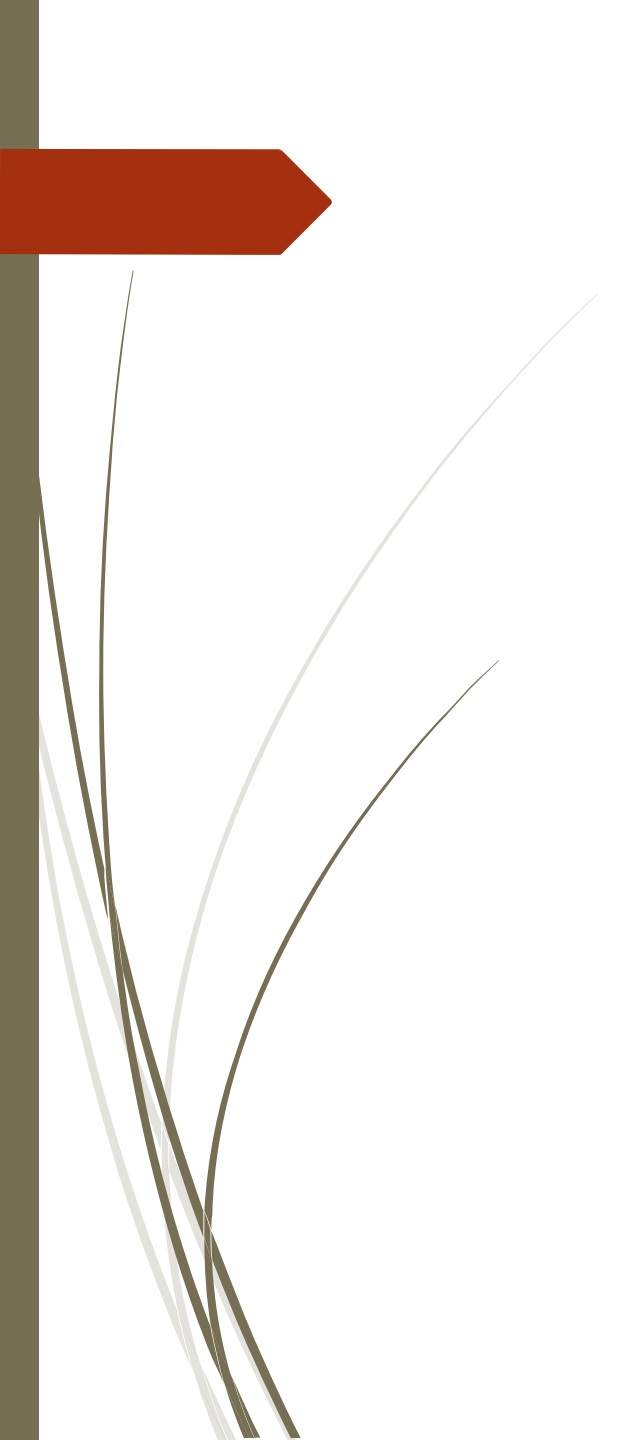
Клітинне та системне моделювання

Клітинне моделювання фокусується на вивченні окремих клітин і їх внутрішніх процесів. Воно може включати:

- Моделювання метаболічних шляхів: Дослідження хімічних реакцій, які відбуваються в клітинах, і як вони взаємодіють між собою.
- Сигнальні каскади: Моделювання механізмів, через які клітини реагують на зовнішні сигнали, що є важливим для розуміння клітинної комунікації.
- Молекулярна динаміка: Використання комп'ютерного моделювання для вивчення руху молекул у клітині, включаючи білки та нуклеїнові кислоти.

Системне моделювання розглядає біологічні системи як цілісні утворення, що складаються з багатьох взаємопов'язаних компонентів. Основні аспекти включають:

- Моделювання біогеоценозів: Дослідження екосистем і їх взаємодій, включно популяційні динаміки та екологічні взаємозв'язки.
- Генетичні регуляторні мережі: Моделювання, яке допомагає зрозуміти, як гени взаємодіють і регулюють один одного в контексті клітинних функцій.
- Системна біологія: Інтеграція даних з різних рівнів (молекулярного, клітинного, організменного) для створення комплексних моделей, які можуть прогнозувати поведінку біологічних систем.

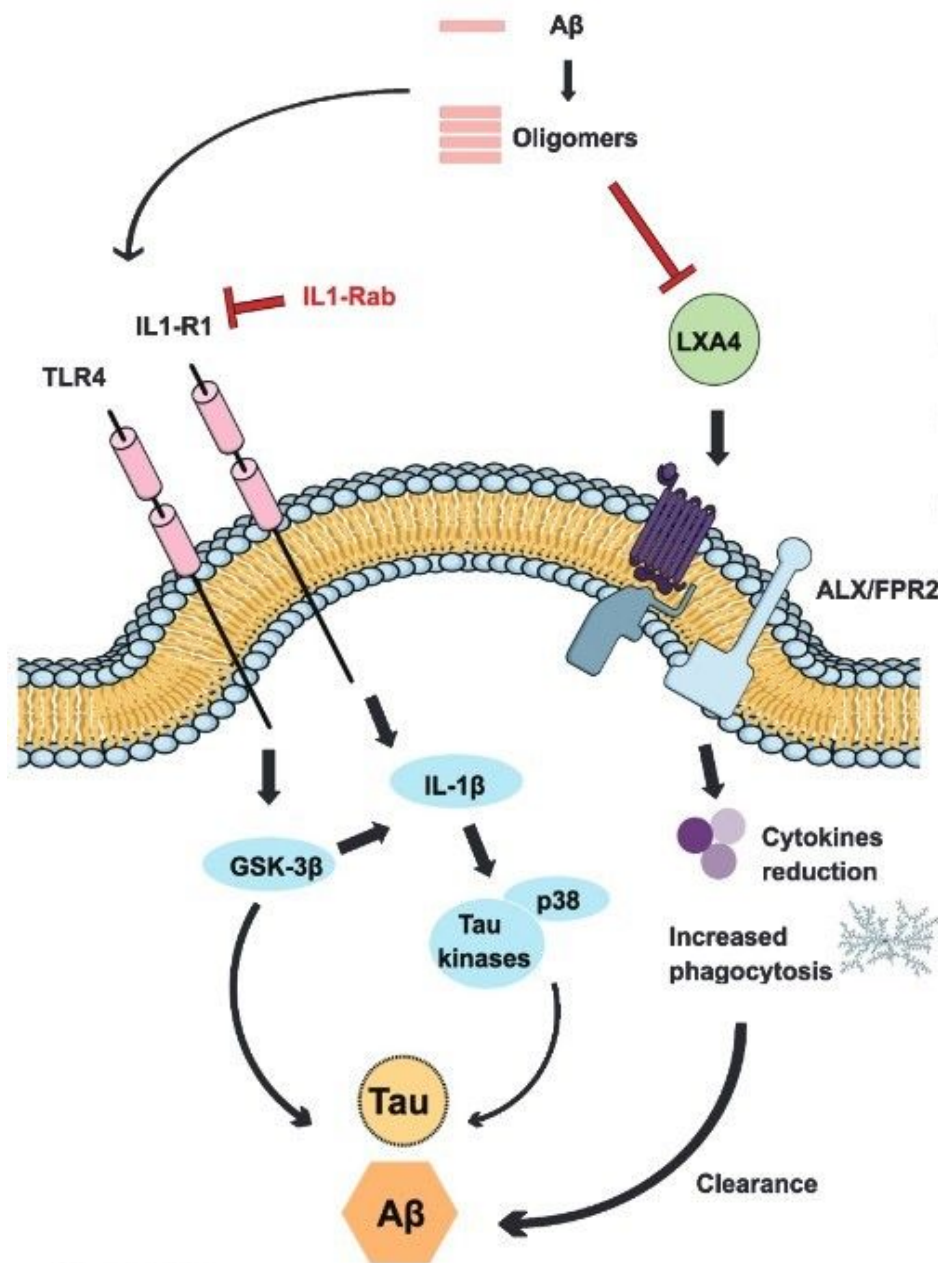


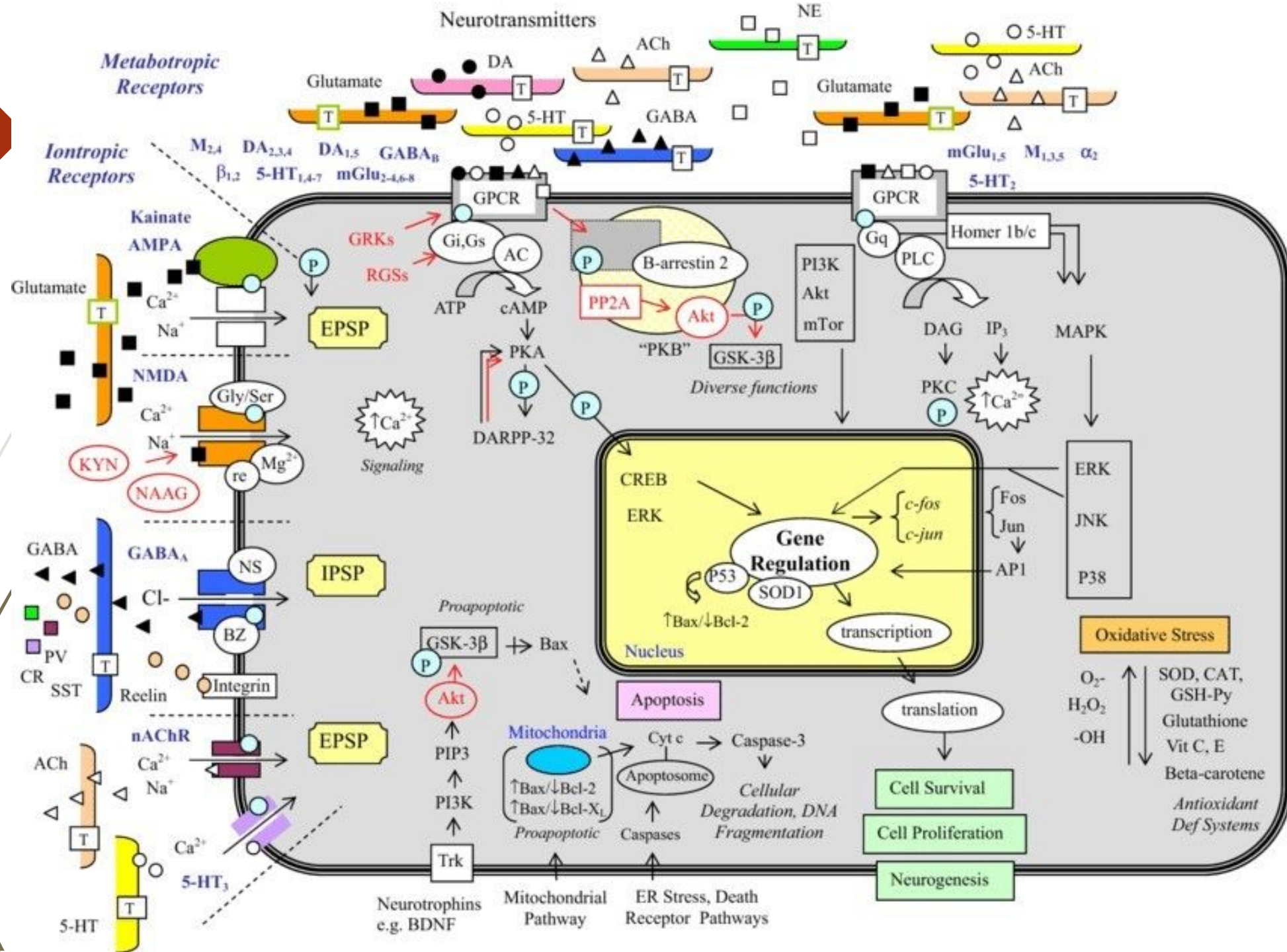
Технології та програмне забезпечення

Для реалізації клітинного та системного моделювання використовуються різноманітні технології та програмне забезпечення, такі як:

- **VCell**: Для моделювання клітинних процесів.
- **CellDesigner**: Для візуалізації та моделювання біологічних систем.
- **GROMACS**: Для молекулярної динаміки.
- **Chimera**: Для візуалізації молекул і моделювання їх взаємодій.

Приклади
моделей
сигнальних
каскадів





Метаболічні шляхи та сигнальні каскади

Метаболічні шляхи представляють собою послідовність хімічних реакцій, які відбуваються в клітині для перетворення речовин. Моделювання цих шляхів дозволяє:

Аналізувати енергетичні потоки: Визначати, як енергія та метаболіти переміщуються через різні етапи реакцій.

Прогнозувати вплив змін: Досліджувати, як зміни в одному з елементів шляху (наприклад, фермент) можуть вплинути на загальний метаболізм.

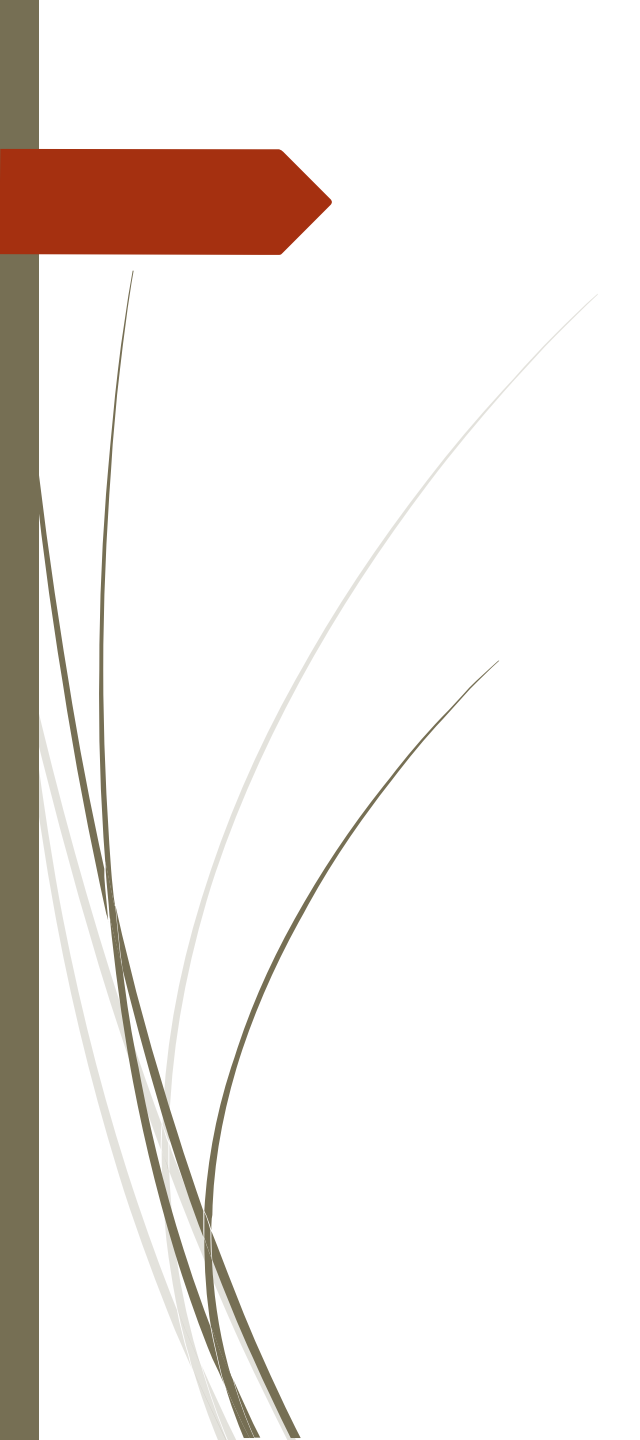
Оптимізувати біотехнологічні процеси: Використовувати моделі для покращення виробництва біопродуктів.

Сигнальні каскади — це складні мережі молекулярних взаємодій, які дозволяють клітинам реагувати на зовнішні сигнали. Моделювання сигнальних каскадів включає:

Вивчення механізмів передачі сигналів: Моделі допомагають зрозуміти, як сигнали перетворюються в клітинні відповіді.

Аналіз регуляторних механізмів: Дослідження, як різні молекули (наприклад, гормони) регулюють активність генів і білків.

Прогнозування клітинних відповідей: Використання моделей для передбачення, як клітини реагують на різні стресові фактори або ліки.



Технології та програмне забезпечення

Для моделювання клітинних процесів використовуються різноманітні технології та програмне забезпечення:

VCell (Virtual Cell): Дозволяє моделювати клітинні процеси, включаючи метаболічні шляхи та сигнальні каскади.

CellDesigner: Інструмент для візуалізації та моделювання біологічних систем, що підтримує стандарт SBML (Systems Biology Markup Language).

GROMACS: Програмне забезпечення для молекулярної динаміки, яке може бути використане для моделювання руху молекул у метаболічних шляхах.

Chimera: Дозволяє візуалізувати молекули та їх взаємодії, що є корисним для аналізу сигнальних каскадів.



Безкоштовні програми для моделювання біологічних систем

PyMOL

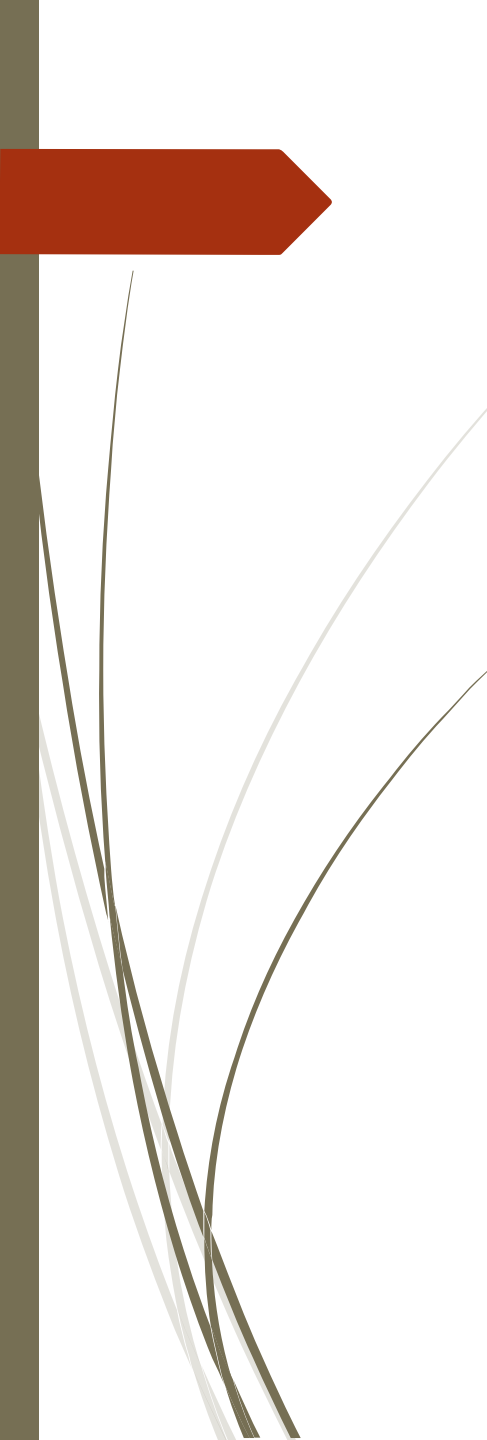
PyMOL — потужне програмне забезпечення для візуалізації молекул, яке дозволяє досліджувати структуру білків та нуклеїнових кислот. Воно підтримує різноманітні формати файлів і дозволяє створювати високоякісні 3D-візуалізації та аналізувати взаємодії.

Blender

Blender — безкоштовне та відкрите програмне забезпечення для 3Dмоделювання. Хоча воно не спеціалізується на біології, його потужні інструменти можна використовувати для створення анімації біологічних процесів.

Scratch

Scratch — інтерактивна платформа з відкритим вихідним кодом, яка дозволяє створювати анімацію та ігри без необхідності програмування. Вона підходить для освіти і може бути використана для створення простих анімацій біологічних моделей. Ці безкоштовні програми пропонують широкий спектр можливостей для моделювання та візуалізації біологічних систем, створюючи їх доступними для студентів та дослідників.



Безкоштовні програми для моделювання біологічних систем, що підтримують анімацію

PyMOL

PyMOL — потужне програмне забезпечення для візуалізації молекул, яке дозволяє досліджувати структуру білків та нуклеїнових кислот. Воно підтримує різноманітні формати файлів і дозволяє створювати високоякісні 3D-візуалізації та аналізувати взаємодії.

Blender

Blender — безкоштовне та відкрите програмне забезпечення для 3Dмоделювання. Хоча воно не спеціалізується на біології, його потужні інструменти можна використовувати для створення анімації біологічних процесів.

VCell (віртуальна клітина)

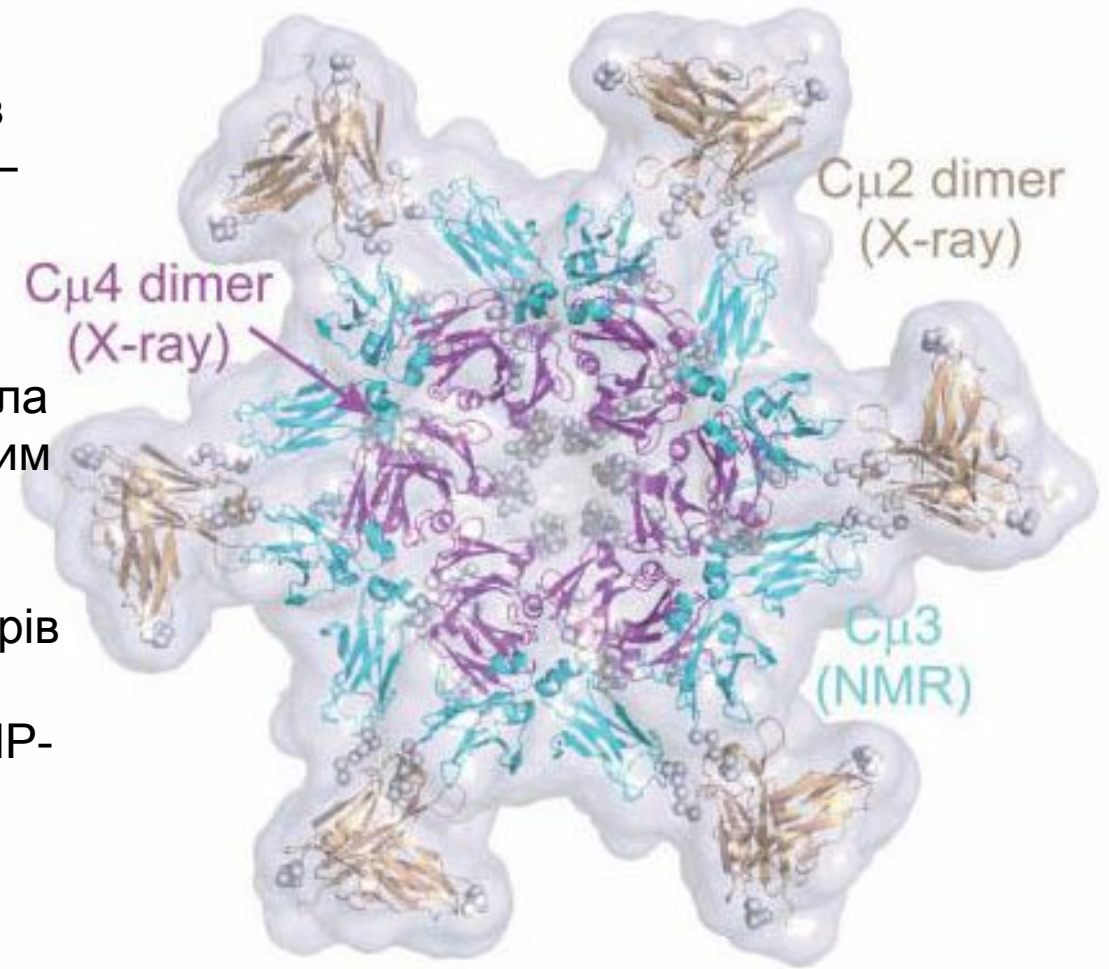
VCell — програмне забезпечення для моделювання клітинних процесів, яке дозволяє створювати анімації, що ілюструють динаміку молекули в клітинному середовищі. Це особливо корисно для дослідження взаємодії між білками та ДНК.

Chimera

Chimera — програмне забезпечення для візуалізації та аналізу біомолекул, яке підтримує анімацію. Воно дозволяє моделювати та візуалізувати взаємодію між білками та ДНК, а також створювати анімації для демонстрації цих процесів.

Моделювання та візуалізація внутрішніх структур біологічних об'єктів

Складну структуру імуноглобуліну було визначено поєднанням методів SAXS (Small Angle X-ray Scattering — малокутового розсіювання рентгенівських променів) та ЯМР (ядерного магнітного резонансу). Імуноглобулін IgM - ключова молекула імунної системи людини, що є першим антитілом, що виробляється в ході імунної реакції. Структури окремих молекул імуноглобуліну ($C\mu$ мономерів і димерів) були визначені методом рентгенівської кристалографії та ЯМР-спектроскопії. зв'язків.





Моделювання органів та систем органів

Основні аспекти моделювання органів та систем органів включають:

1. Біодрук органів

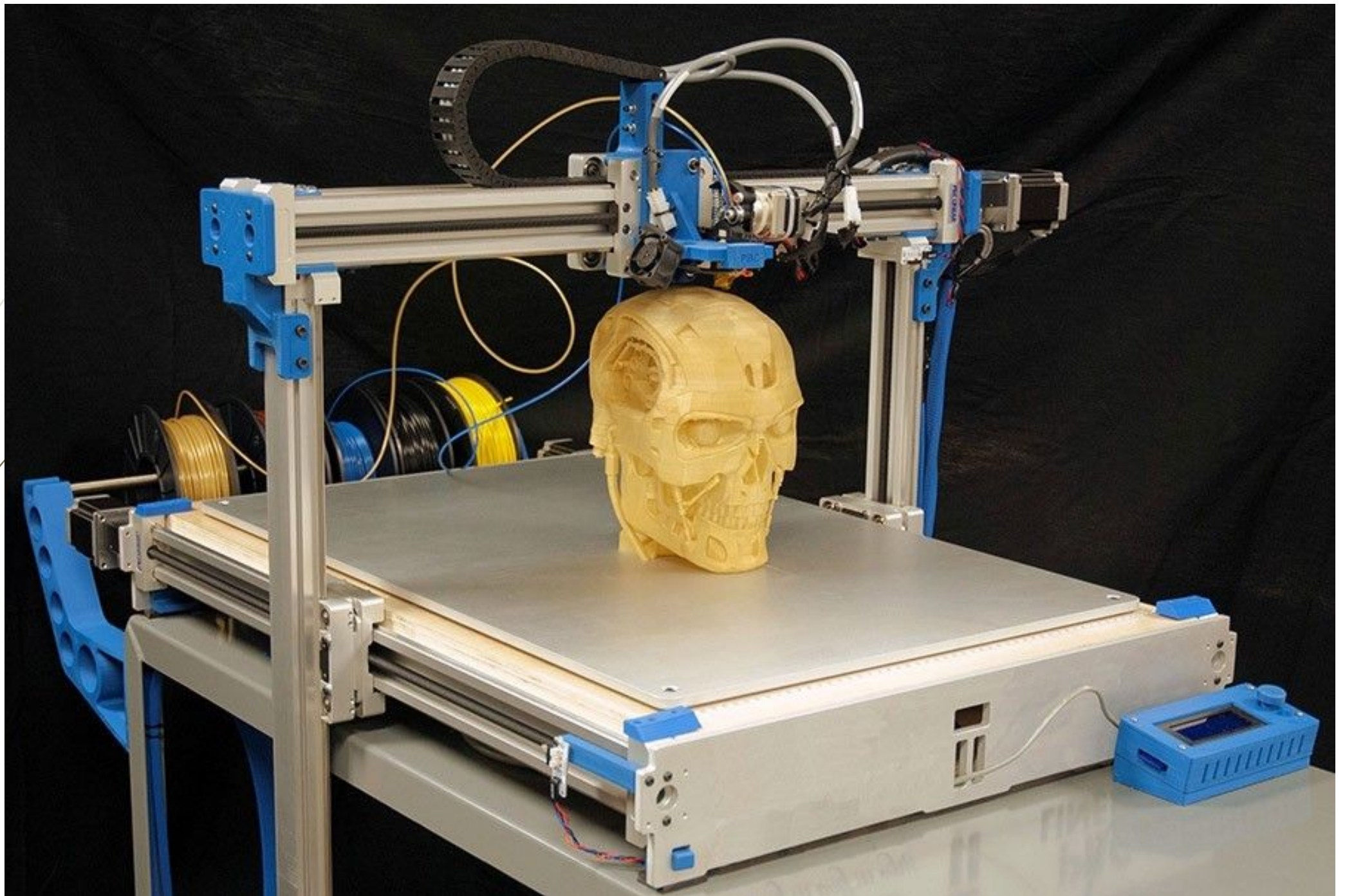
Біодрук, або 3D-друк органів, є технологією, що дозволяє створювати тривимірні структури, які можуть імітувати натуральні органи. Ця технологія використовує спеціалізовані матеріали, такі як гідрогелі, для формування тканин, що можуть інтегруватися в людське тіло. Основною метою біодруку є створення органів для трансплантації та досліджень.

2. Моделювання біологічних систем

Моделювання біологічних систем включає використання обчислювальних методів для вивчення складних взаємодій між клітинами, органами та системами органів. Це може включати моделювання метаболічних шляхів, сигнальних каскадів та інших клітинних процесів.

3. Системна біологія

Системна біологія використовує комп'ютерні моделі для інтеграції даних з різних рівнів організації (молекулярного, клітинного, організменного) для створення комплексних моделей органів та їх функцій. Це дозволяє вивчати, як органи взаємодіють один з одним і як зміни в одному органі можуть вплинути на всю систему.



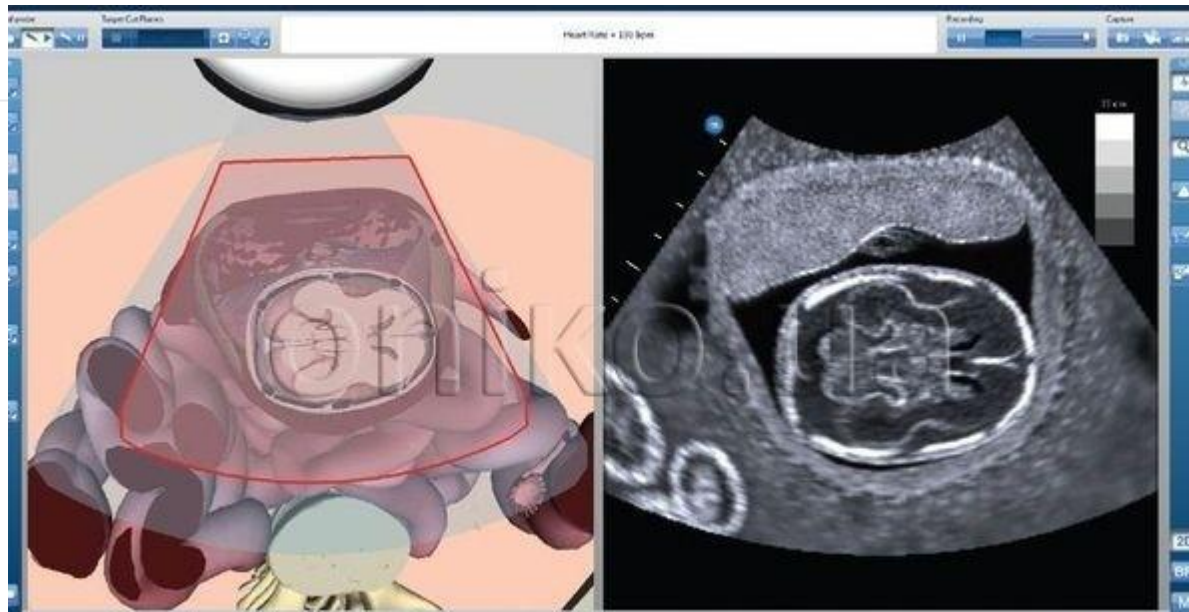
Моделювання органів та систем органів

4. Візуалізація та симуляція

Сучасні технології візуалізації, такі як комп'ютерна томографія (КТ) та магнітно-резонансна томографія (МРТ), використовуються для отримання детальних зображень органів, які потім можуть бути використані для створення моделей. Ці моделі можуть симулювати функції органів, їх реакції на ліки або інші зовнішні фактори.

5. Моделювання функцій органів

Моделі можуть бути використані для вивчення специфічних функцій органів, таких як серцевий ритм, дихальні процеси або функції печінки. Це допомагає в розробці нових терапій та лікувальних стратегій.

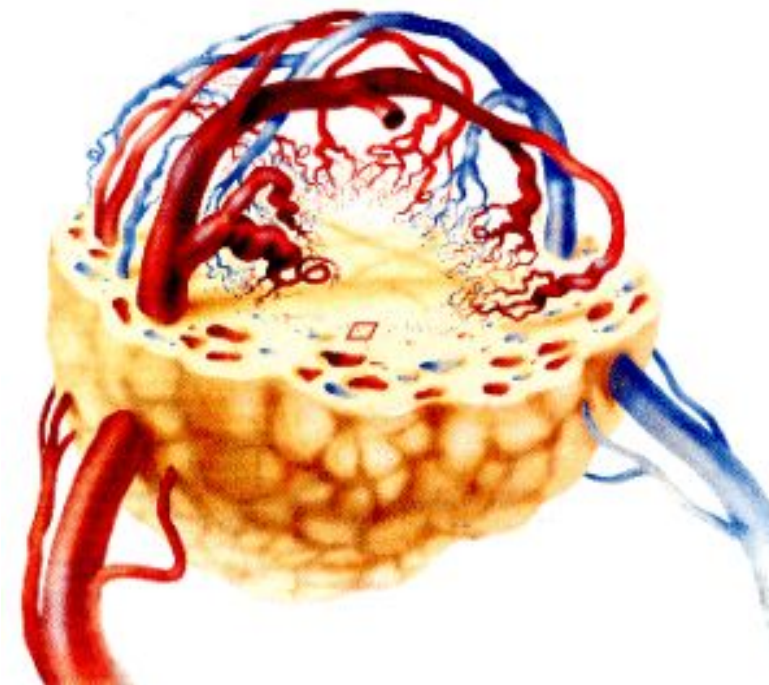


Ангіогенез – візуалізація математичної моделі

Пухлинний ангіогенез можна моделювати за допомогою системи диференціальних рівнянь у частинних похідних. Модель зосереджена на розпаді фібронектину та переміщенні ендотеліальних клітин уздовж стінки капіляра як на критичних етапах формування нових капілярів.

Вона використовує принципи хімічної кінетики та випадкових блукань для опису цих процесів.

Сильно васкуляризована пухлина (взято з <http://www.maths.dundee.ac.uk/~sanderso/tumour.htm>)



НЕФРОН І МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Кров повинна очищати всі забруднення, які постійно виробляє організм.

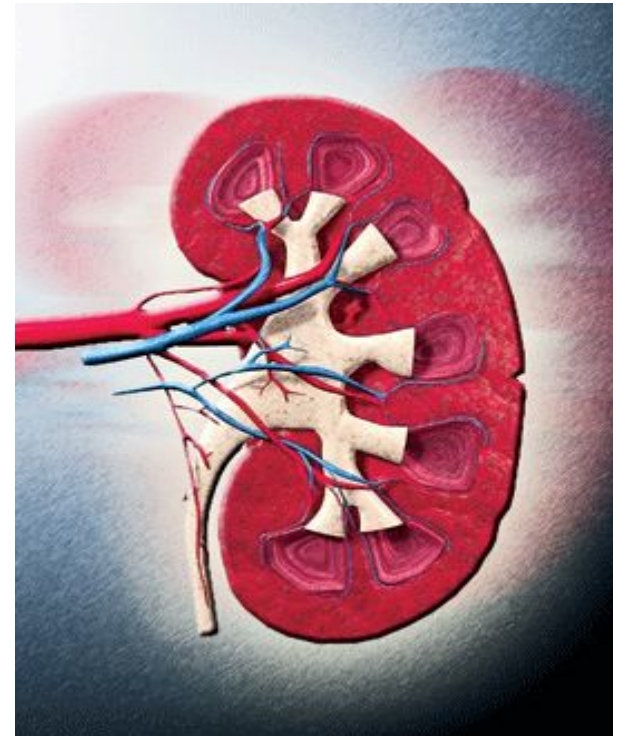
180 літрів крові, які щодня проходять через нирки, фільтруються через невеликі структури, які називаються нефронами.

Кожен нефрон містить невелику кровоносну судину — клубочок — який переплітається з тисячами канальців для збору сечі, які також є частиною нирки.

Там відбувається складний хімічний обмін, під час якого відходи змішуються з водою, щоб вийти з крові у вигляді сечі.

Математична модель Маріано Маркано також враховує інші фактори, які імітують реальність.

Такі моделі необхідні для створення штучних органів з функціями, максимально наближеними до можливостей справжнього органу.





Моделювання еволюційних процесів.

Типові задачі

Розуміння еволюції: Моделювання допомагає нам зрозуміти складні процеси еволюції, які можуть бути важко спостерігати в реальному світі.

Прогнозування: Ми можемо використовувати моделі для прогнозування майбутніх еволюційних змін, що має важливе значення для багатьох областей, від біології до екології.

Розробка нових теорій: Моделювання дозволяє нам перевіряти нові гіпотези та розвивати нові теорії про еволюцію.

Основні поняття та методи

Еволюційна алгоритміка: Це галузь, яка займається розробкою алгоритмів, що імітують природний добір та інші еволюційні процеси.

Генетичні алгоритми: Один з найпоширеніших типів еволюційних алгоритмів, який використовує поняття генів, хромосом та мутацій для пошуку оптимальних розв'язків.

Агент-базоване моделювання: В цьому підході кожна істота в моделі є окремим агентом, який має свої власні характеристики та поведінку.

Симуляції екосистем: Моделювання взаємодії між різними видами та їхнім середовищем.

Приклади програмних пакетів для комп'ютерного моделювання: NetLogo, AnyLogic, MATLAB.



Моделювання еволюційних процесів

Відстеження еволюції вірусу під час поширення інфекційного захворювання.

Еволюційні зміни є ознакою біологічних систем. РНК-віруси, такі як ВІЛ, гепатити В та С, коронавірус, постійно мутують, розвиваючи стійкість до ліків, уникаючи імунної відповіді та створюючи нові інфекції. Зразки секвенованих патогенів від тисяч інфікованих осіб можна використовувати для ідентифікації мільйонів вірусних варіантів, що розвиваються.

Мутують популяції пухлинних клітин.

У таких системах еволюційні зміни відбуваються в часовому масштабі, який можна спостерігати, і еволюційна динаміка відповідає за клінічні результати захворювання. Прикладом використання еволюційного моделювання та популяційної генетики є модель еволюції ВІЛ-1 у організмі хазяїна та розвиток колоректального раку.

Моделювання еволюційних процесів.

Приклади застосування

Біологія:

Моделювання еволюції стійкості до антибіотиків у бактерій.

Дослідження еволюції співробітництва між видами.

Вивчення еволюції статі.

Екологія:

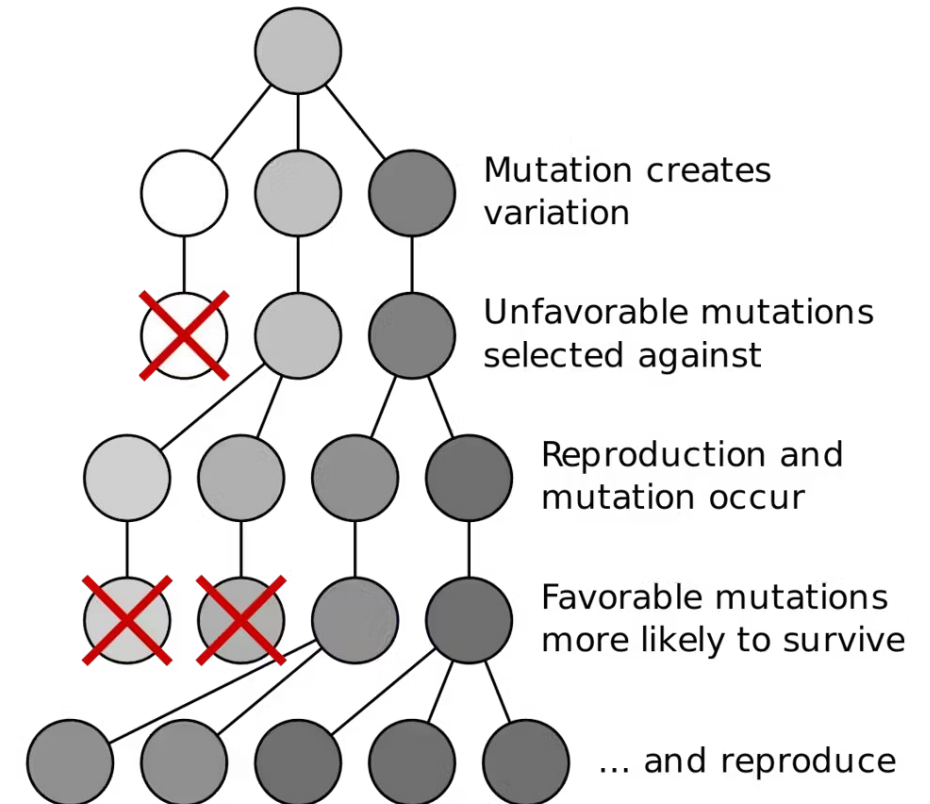
Моделювання поширення інвазивних видів.

Дослідження впливу зміни клімату на екосистеми.

Штучний інтелект:

Розробка еволюційних алгоритмів для оптимізації нейронних мереж.

Створення штучного життя.



В еволюційній біології спостереження не завжди дають відповідь, який фактор сформував певну рису чи поведінку. Причини можуть полягати в тиску, який зазнавала популяція в минулому, або, можливо, тиск проявляється лише через тисячі поколінь.

Щоб відповісти на такі питання, як «Чому найвищі самки гієн не беруть участь у полюванні?», слід вивчити наслідки різних припущень щодо довгострокового виживання групи.

Еволюційна теорія говорить, що в довгостроковій перспективі виживають лише корисні риси, але часто буває важко зрозуміти, як певна риса може допомогти. Це пов'язано з усіма тими компромісами, які я згадав, і іноді переваги риси стають очевидними лише через довгий час.

Зрештою, еволюція мала мільйони років випробувань, невдач і успіхів. Навіть 50 років спостережень можуть не розкрити нам довгострокові наслідки набору рис і те, як вони взаємодіють і відтворюються в складному світі.

Але комп'ютер може розрахувати це за лічені хвилини, оскільки популяцію з 1000 газелей і групу, скажімо, із 150 гієн, можна прослідкувати протягом тисяч імітованих поколінь.

В еволюційній науці комп'ютери є машинами для передбачення: вони відповідають на запитання на кшталт «Що станеться за цими правилами, враховуючи, що я почав у цьому світі з такими початковими умовами?»

У дослідженні еволюційного походження уникнення ризику було сформульовано питання: «Що станеться з уникненням ризику, якщо загальна популяція велика, але складна, і ризик зменшується міграцією між ними?» Виконання сценарію показало, що уникнення ризику рідко відбувається, і швидкість міграції не була надзвичайно високою.



Методи моделювання популяцій та екосистем

Основні методи включають:

1. Математичні моделі

Математичні моделі використовують рівняння для опису динаміки популяцій та екосистем. Вони можуть включати:

Моделі з віковою структурою: Описують зміни в популяціях організмів з урахуванням вікових груп.

Моделі Лотки-Вольтерри: Описують взаємодію хижаків і жертв в екосистемах.

Моделі Ферхюльста: Враховують обмеження росту популяцій через нестачу ресурсів.

Просторово-розподілені моделі: Враховують просторову структуру екосистеми та взаємодії між різними її частинами.

Статистичні моделі: Використовуються для аналізу даних та прогнозування тенденцій в екологічних системах.

2. Імітаційні моделі

Імітаційні моделі дозволяють проводити експерименти в комп'ютерному середовищі, моделюючи різні сценарії впливу на екосистеми. Вони можуть включати:

Моделі системи агентів: Досліджують поведінку індивідуумів у популяціях та їх взаємодії, що дозволяє моделювати складні соціальні та екологічні процеси.

Динамічні моделі систем: Використовують системи диференціальних рівнянь для опису змін у часі, що допомагає вивчати, як популяції реагують на зміни в середовищі.

Методи моделювання популяцій та екосистем

3. Екологічні моделі

Ці моделі фокусуються на конкретних аспектах екології, таких як:

□ **Моделі популяцій**: Досліджують динаміку чисельності видів, їх взаємодії та вплив середовища.

□ **Моделі біогеохімічних циклів**: Оцінюють, як елементи, такі як вуглець і азот, циркулюють в екосистемах.

4. Геоінформаційні системи (ГІС)

ГІС використовуються для аналізу просторових даних та візуалізації екологічних систем. Вони дозволяють інтегрувати різноманітні дані, такі як кліматичні умови, використання земель та біорізноманіття, для кращого розуміння екосистем.

5. Статистичні моделі

Ці моделі аналізують дані про популяції, щоб виявити тенденції і прогнозувати майбутні зміни. Вони можуть включати регресійний аналіз, моделі виживаності та інші статистичні методи.

6. Моделі біогеохімічних циклів

Ці моделі вивчають, як елементи, такі як вуглець і азот, циркулюють в екосистемах, що впливає на динаміку популяцій. Ці методи моделювання є важливими інструментами для екологів, оскільки вони дозволяють прогнозувати наслідки антропогенного впливу, оцінювати стійкість популяцій і розробляти стратегії управління природними ресурсами.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

1. Необмежений ріст. Експоненціальне зростання. Самокаталіз (Автокаталіз)

Швидкість зростання пропорційна чисельності популяції, незалежно від того, чи це популяція зайців чи популяція клітин; це одне з фундаментальних припущень, що лежать в основі всіх моделей зростання. Для багатьох одноклітинних організмів або для клітин, що містяться в клітинних тканинах, проліферація означає простий поділ, тобто подвоєння числа клітин за певний проміжок часу, який називається характерним часом поділу. Розмноження рослин і тварин, організація яких є складною, відбувається за більш складними законами; однак у найпростішій моделі можна припустити, що швидкість розповсюдження виду пропорційна чисельності цього виду. Це записується математично за допомогою диференціального рівняння, лінійного відносно змінної x , що характеризує чисельність (концентрацію) особин у популяції:

$$\frac{dx}{dt} = rx \tag{1}$$

Тут r може бути, в загальному випадку, функцією як кількості, так і часу, або залежати від інших зовнішніх і внутрішніх параметрів.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Закон (1) був сформульований Томасом Робертом Мальтусом (1766-1834) у його книзі «Про зростання населення» (1798). Відповідно до (1), якщо коефіцієнт пропорційності **$r=const$** (як припустив Мальтус), то кількість особин в популяції росте експоненціально і безмежно:

$$x=x_0 e^{rt}; \quad x_0=x(t=0) \quad (2)$$

Для більшості популяцій існують обмежувальні чинники, і зростання популяції припиняється через низку причин. Єдиний виняток становить популяція людей: протягом усього історичного часу вона зростає навіть швидше, ніж експоненціально. Дослідження, проведені Мальтусом, справили великий вплив як на економістів, так і на біологів, зокрема Чарльз Дарвін у своїх щоденниках детально аналізує **теорію Мальтуса**. Боротьбу за існування в реальній живій природі Дарвін розуміє як одну з причин порушення закону Мальтуса. Закон експоненціального зростання справедливий на певній стадії росту для популяцій клітин у тканині, для водоростей чи бактерій у культурі. У моделях математичний вираз, який описує збільшення швидкості зміни величини, називається автокаталітичним терміном (каталіз означає зміну швидкості реакції, зазвичай прискорення, за допомогою речовин, які не беруть участі в реакції), а автокаталіз означає «самоприскорення» реакції.

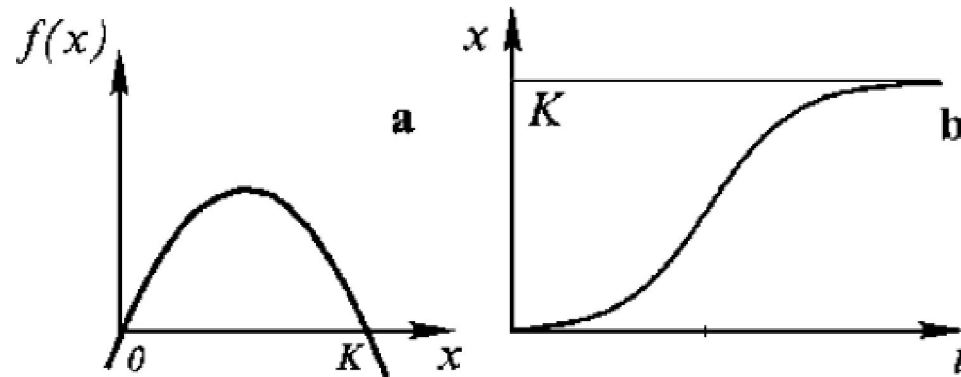
МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

2. Обмежений ріст. Рівняння Верхюльста.

Модель Верхюльста (1848) є базовою моделлю, яка описує обмежене зростання:

$$dx/dt = rx(1-x/K) \quad (3)$$

Параметр K називається «ємністю населення» і виражається в одиницях об'єктів (концентрації); вона носить системний характер, тобто визначається низкою різних факторів. Серед останніх це обмеження кількості субстрату для мікроорганізмів, місця, доступного для клітинної популяції в тканині, харчової бази або притулку для вищих тварин. Діаграми залежності правої частини рівняння (3) від кількості x і чисельності населення від часу представлені на малюнках нижче.



МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Дослідження дискретного аналога рівняння (3) у другій половині 20-го століття виявило свої абсолютно нові та чудові властивості. Розглянемо чисельність популяції в послідовні моменти часу, що відповідає реальній процедурі підрахунку видів (або клітин) у популяції. Залежність чисел на часовому кроці з номером $n+1$ від чисел на попередньому кроці n можна записати як

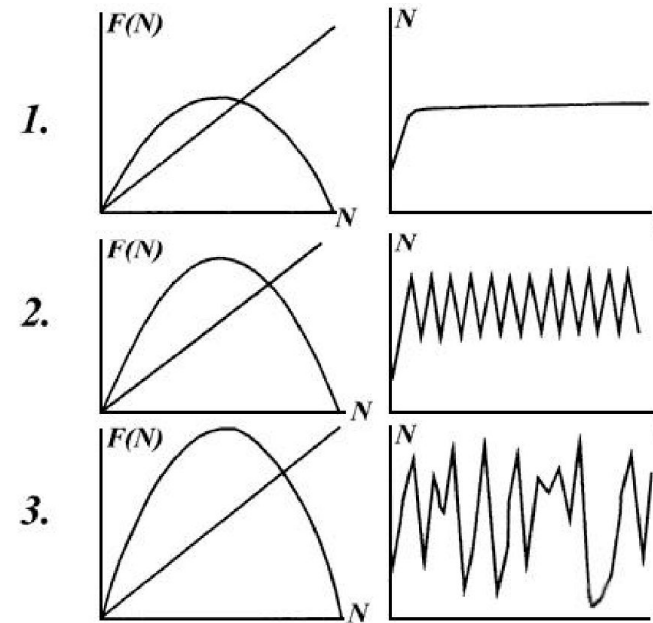
$$x_{n+1} = rx_n(1-x_n) \quad (4)$$

Поведінка змінної x_n у часі залежно від параметра r може характеризуватися не тільки необмеженим зростанням, як це було в безперервній моделі (3), але й бути коливальним або квазістохастичним, як це показано на малюнку нижче зліва.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Коли діаграма ліворуч стає крутішою, стійка рівновага переходить у стійкі цикли. Зі збільшенням чисел збільшується довжина циклу, і значення чисел повторюються в $2, 4, 8, \dots 2^n$ поколіннях. При значенні $r > 2,570$ відбувається хаотизація розчинів. При досить великому r динаміка популяції демонструє хаотичні стрибки (спалахи чисельності комах). Рівняння такого типу описують динаміку чисельності сезонно розмножуваних комах із неперекриваючими поколіннями.

Рис. (а) залежність чисел на наступному кроці від чисел на попередньому кроці та (б) поведінка чисел при різних значеннях параметра r для дискретної моделі логістичного зростання (3): (1) обмежене зростання; (2) коливання; (3) хаос.



При малих r ($r < 3$) чисельність популяції прагне до стійкої рівноваги.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Дискретний опис виявився корисним для систем найрізноманітнішої природи. Представлення динамічної поведінки системи на площині в координатах $[x_t, x_{t+T}]$ дозволяє визначити, чи є спостережувана система коливальною, чи квазістохастичною.

Так, наприклад, таке представлення даних кардіограми дозволило встановити, що в нормі систола серця людини носить нерегулярний характер, а в період нападів стенокардії або в передінфарктному стані систолічний ритм стає суворо регулярним. Такий «жорсткий» режим «загострення» є захисною реакцією організму в стресовій ситуації і вказує на небезпеку для життя системи.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

3. Конкуренція. Вибір

Біологічні системи взаємодіють одна з одною на всіх рівнях, чи то взаємодія макромолекул у процесі біохімічних реакцій, чи взаємодія видів у популяціях. Взаємодія може відбуватися в структурах, тоді система може характеризуватися певним набором станів, що відбувається на рівні субклітинних, клітинних і організованих структур. Кінетика процесів у структурах описується в математичних моделях, як правило, системами рівнянь для ймовірностей станів комплексів. У випадку, коли взаємодія відбувається випадково, її інтенсивність визначається концентрацією взаємодіючих компонентів і їх рухливістю, узагальненою дифузією. Це поняття, які є загальноприйнятими в базових моделях взаємодії видів.

Класичною книгою стала монографія Віто Вольтерра «Математична теорія боротьби за існування» (1931), в якій розглядалися математичні моделі взаємодії видів. У цій книзі властивості біологічних об'єктів та їх взаємодія постулюються в математичній формі, а потім розглядаються як математичні об'єкти.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Цей ефект зростання чисельності хижаків в умовах зростання чисельності жертв був передбачений моделлю «хижак-жертва», запропонованою Вольтерра.

Підтверджено: коли в роки Першої світової війни (і відразу після неї) інтенсивність промислу різко впала, відносна частка хижаків в улові зросла.

Вольтерра припустив, за аналогією зі статистичною фізикою, що інтенсивність взаємодії пропорційна ймовірності зустрічі (ймовірності зіткнення молекул), тобто добутку концентрацій.

Ці та деякі інші припущення дозволили побудувати математичну теорію взаємодії між популяціями одного трофічного рівня (конкуренція, симбіоз) або різних трофічних рівнів (хижак–жертва, паразит–господар).

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Інші приклади класичних моделей:

Обмеження субстратом. Моделі Моно та Міхаеліса–Ментена

Дефіцит їжі є одним з обмежень для росту (на мікробіологічній мові, обмеження субстрату). Швидкість росту зростає пропорційно концентрації субстрату, і при надлишку субстрату досягає постійного значення, яке визначається генетичними можливостями популяції.

Класичні моделі Лотка–Вольтерра

Найпростіші нелінійні моделі взаємодії між хімічними речовинами в рівняннях Лотка і між видами в моделях Вольтерра дозволили вперше зрозуміти, що в енергетично насиченій системі можливі автоколивання завдяки специфіці взаємодії між його компоненти.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Моделі взаємодії видів

У середині 20 століття інтерес до екології та швидкий розвиток обчислювальної техніки, яка дозволила розв'язувати та досліджувати системи нелінійних рівнянь, стимулювали розвиток популяційної динаміки.

Моделі ферментативного каталізу

Ферменти є вузькоспеціалізованими каталізаторами, що прискорюють швидкість біохімічних реакцій у сотні тисяч і мільйони разів. Будь-яке ферментативне перетворення починається з фіксації молекул субстрату активним центром ферменту і завершується розривом цих фіксацій.

Модель безперервної культури мікроорганізмів

Мікробіологічні популяції є хорошим експериментальним об'єктом для перевірки ідей і результатів як екологічних, так і еволюційних ідей. У біотехнології для розрахунку оптимальних режимів культивування застосовуються формули, що враховують інші особливості метаболізму самих мікроорганізмів, а також умов їх культивування.

Системи для моделювання екосистем

Спеціалізовані програмні пакети, такі як:

- **Ecopath with Ecosim**: Використовується для моделювання енергетичних потоків в екосистемах.
- **STELLA**: Дозволяє створювати динамічні моделі для вивчення екологічних процесів.

Геоінформаційні системи (ГІС)

ГІС використовуються для аналізу просторових даних та візуалізації екологічних систем. Вони дозволяють інтегрувати різноманітні дані, такі як кліматичні умови, використання земель та біорізноманіття, для кращого розуміння екосистем.

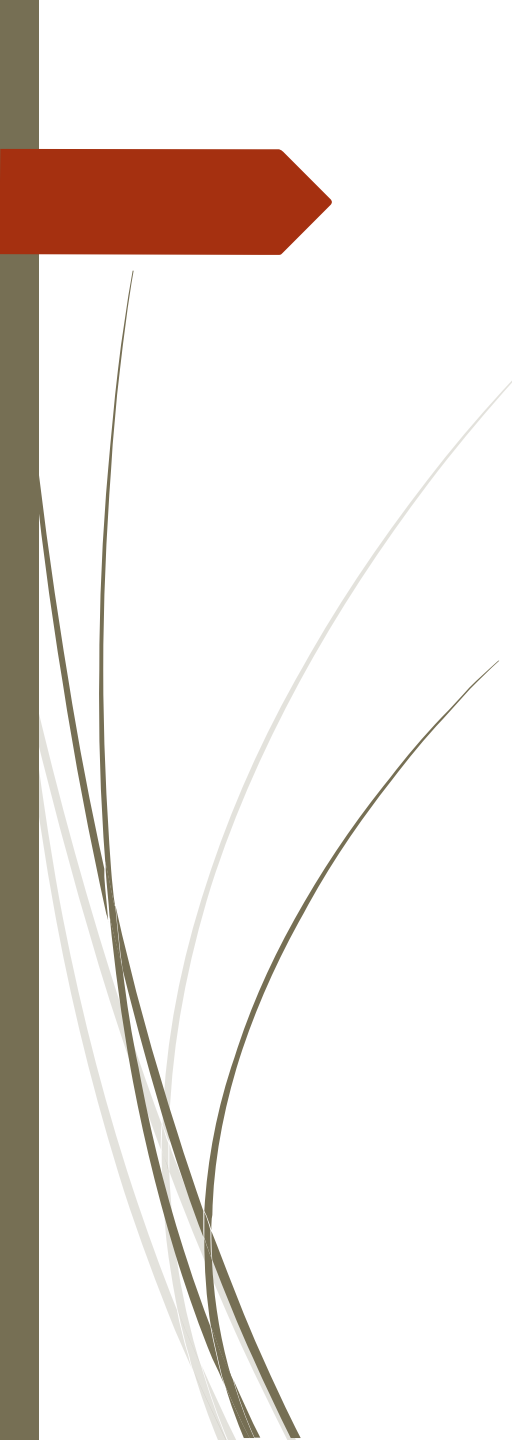
Програмні пакети, що використовуються для моделювання популяцій тварин

RAMAS Ecolab - це інтегрований пакет програм для моделювання популяцій та екосистем. Він включає моделі Лотки-Вольтерри, моделі з віковою структурою та інші математичні моделі для аналізу динаміки популяцій. RAMAS Ecolab дозволяє проводити чутливий аналіз та оцінювати ризики вимирання видів.

VORTEX - це програмний пакет для моделювання популяцій, який фокусується на аналізі ризиків вимирання. Він використовує імітаційне моделювання для прогнозування динаміки популяцій під впливом різних факторів, таких як втрата середовища існування, полювання, хвороби тощо.

ALEX (Animal Landscape and Environmental Simulation) - це система моделювання, розроблена для вивчення впливу змін навколишнього середовища на популяції тварин. Вона поєднує моделі індивідуальної поведінки з просторово-явними моделями середовища існування. ALEX дозволяє досліджувати, як зміни в ландшафті впливають на популяції.

GFLOW - це програмний пакет для моделювання популяцій, який використовує графи для представлення просторової структури популяцій. Він дозволяє моделювати метапопуляції, аналізувати зв'язність середовища існування та оцінювати ризики вимирання.



Моделювання екотоксикологічних процесів

Сучасні технології, що застосовуються для моделювання екотоксикологічних процесів, охоплюють різноманітні підходи та інструменти, які допомагають вивчити вплив токсичних речовин на навколишнє середовище та живі організми. Основні з них включають:

1. Математичне моделювання

Цей підхід дозволяє створити формальні моделі, які описують динаміку забруднення, розподіл токсикантів у середовищі, а також їх вплив на організми. Математичні моделі можуть включати рівняння для опису процесів дифузії, біодеградації та накопичення токсичних речовин.

2. Комп'ютерні симуляції

Симуляційні моделі конструкції для вивчення складних екологічних систем, де взаємодія між різними компонентами може бути складною. Це дозволяє моделювати різні сценарії впливу токсикантів на екосистеми, включно зміни в популяції організмів.

3. Біотестування

Цей метод включає використання живих організмів для оцінки токсичності різних речовин. Біотестування може бути використане для валідації моделей і для розуміння механізмів дії токсикантів на рівні клітин і організмів.



Моделювання екотоксикологічних процесів

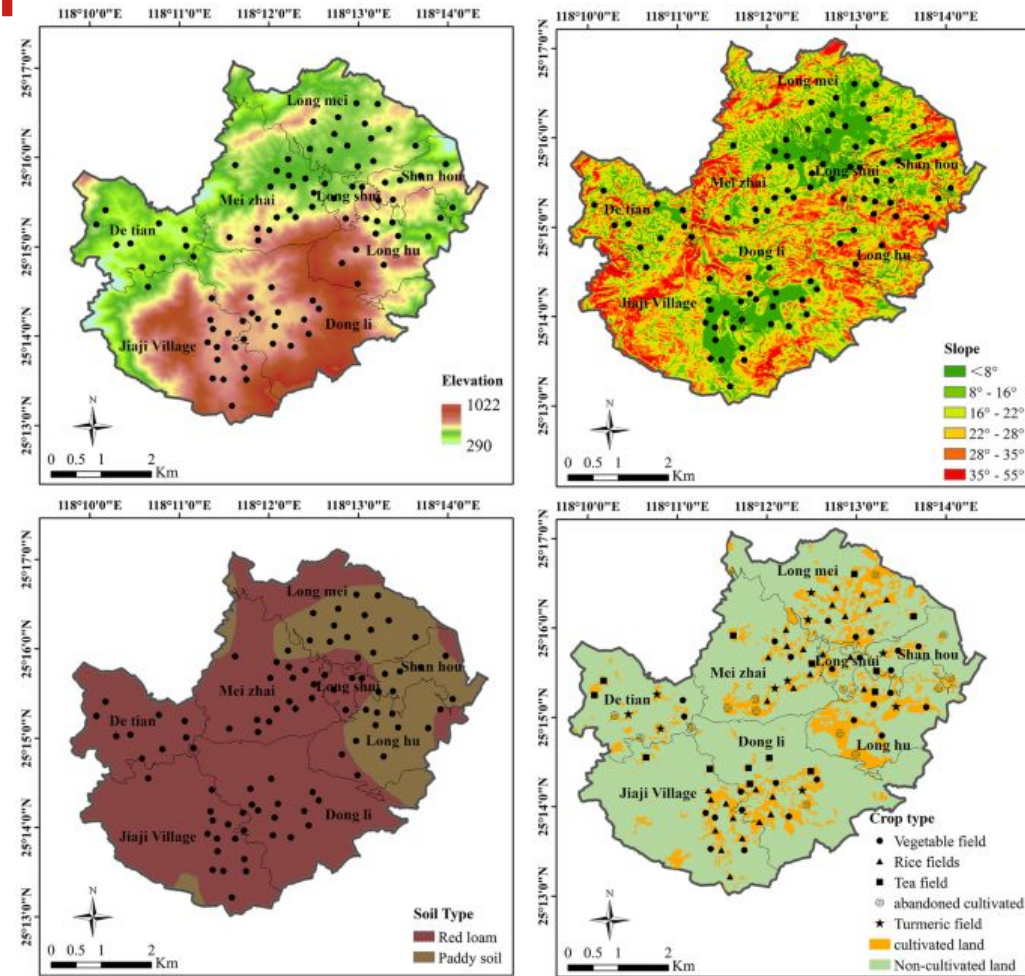
4. ГІС-технології (Геоінформаційні системи)

ГІС-технології не зможуть аналізувати просторові дані про забруднення та його вплив на екосистеми. Ці технології допомагають візуалізувати розподіл токсичних речовин у середовищі та їх вплив на різні біологічні види.

5. Віртуальна реальність (VR) та доповнена реальність (AR)

Ці технології можуть бути використані для візуалізації екологічних процесів і навчання, дозволяючи дослідникам і студентам взаємодіяти з моделями в інтерактивному середовищі. Використання цих технологій дозволяє більш точно оцінювати ризики, пов'язані з токсичними речовинами, і розробляти стратегії їх контролю та управління.

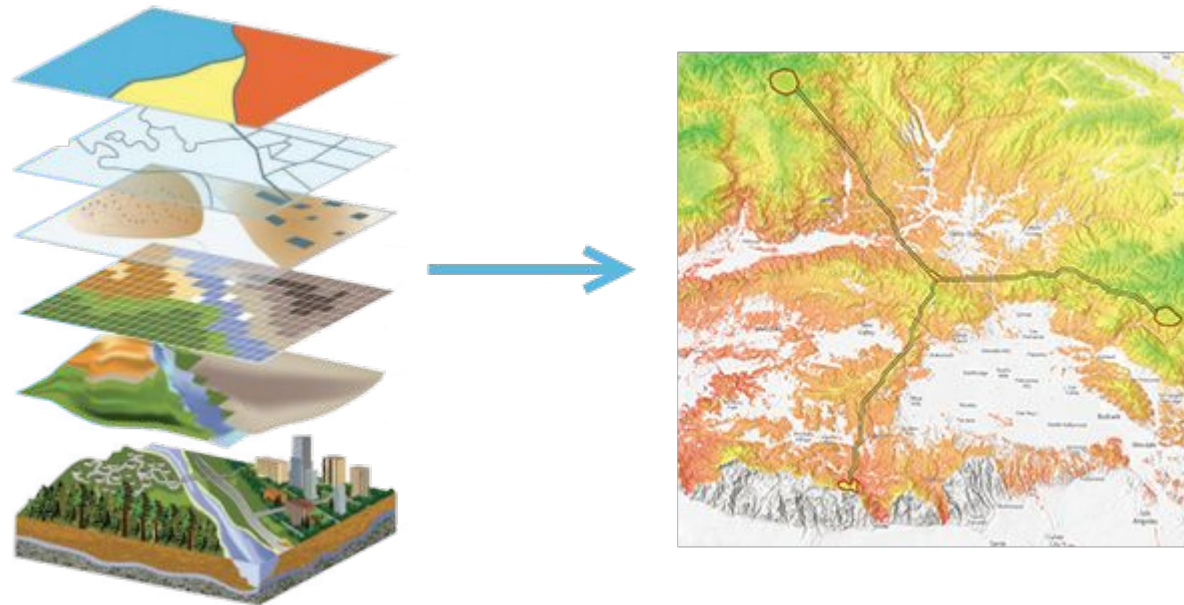
Геоінформаційні моделі



Просторовий розподіл і потенційний екологічний ризик металів(металоїдів) на оброблюваних землях з міста Сяньцзя в Фуцзяні, Південно-Східний Китай

Геоінформаційна модель ArcGIS

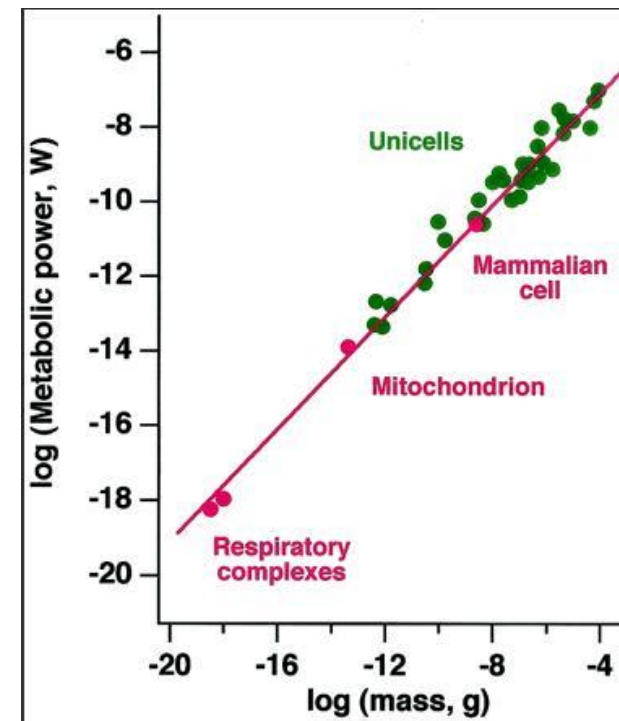
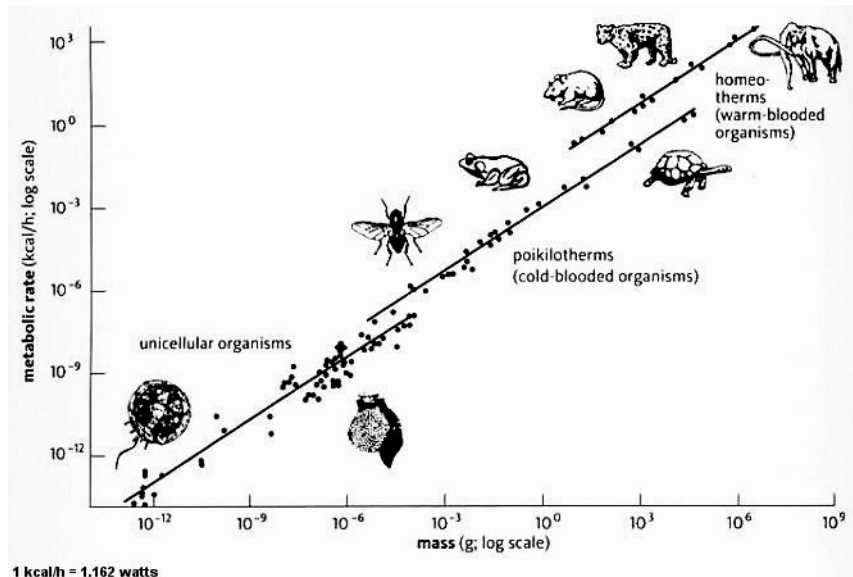
ArcGIS дозволяє користувачам використовувати, створювати та ділитися географічною інформацією у їхній організації, спільноті та відкрито в Інтернеті. Ця інформація включає карти, сцени, шари, аналітику та програми. Елементи з різних джерел можна інтегрувати та об'єднувати в нові елементи та ділитися через веб-сайти, мобільні додатки та додатки для настільних комп'ютерів для певних аудиторій, таких як громадяни, розробники та спеціалісти з ГІС.



Поеднуючи шари та використовуючи оператори та дисплеї, ГІС дає змогу працювати з цими шарами, щоб досліджувати питання та знаходити відповіді. Наприклад, ви можете створити програму, яка моделює території, через які пуми, ймовірно, пройдуть, і визначає безпечні коридори, включаючи природні мости, щоб коти в ізольованих популяціях могли знаходити один одного.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Перші точні вимірювання маси тіла в залежності від швидкості метаболізму в 1932 році показали, що швидкість метаболізму R для всіх організмів точно відповідає $3/4$ степеню маси тіла, тобто R пропорційна $M^{3/4}$. Це відомо як закон Клейбера. Він підходить від найменшої бактерії до найбільшої тварини (мал.1). Зв'язок залишається дійсним навіть для окремих компонентів однієї клітини, таких як мітохондрії та дихальні комплекси (субодиниці мітохондрій), як показано на мал.2. Це також працює для рослин. Це один із небагатьох всеохоплюючих принципів біології. Але універсальність закону спантеличує: чому так багато видів, з їхньою різноманітністю планів тіла, повинні дотримуватися тих самих правил?



МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Пояснення такого роду відносин було запропоновано ще в 1883 році:

Припустимо, що організм має розмір L , тоді площа поверхні A пропорційна L^2 , а об'єм V пропорційний L^3 , припускаючи, що він має форму сфери.

Якщо щільність в організмі $\rho = M / L^3$ постійна, то L пропорційна $M^{1/3}$, де M — загальна маса організму.

Оскільки розсіювання тепла від організму пропорційне площі його поверхні, загальна швидкість метаболізму R пропорційна L^2 пропорційна $M^{2/3}$, що є близьким, але не зовсім таким, як закон $3/4$.

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

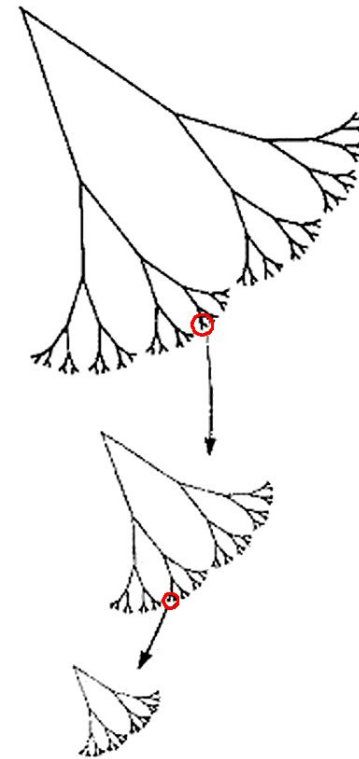
Закон $3/4$ степеня частково впливає з припущення, що мережі розподілу ссавців є «фрактальними» (рисунок), а частково з гіпотези про те, що природний відбір прагнув максимізувати метаболічну здатність «підтримуючи мережі, які займають фіксований відсоток (6 - 7%) об'єму тіла».

Спрощений висновок, який вилучає фрактали з картини, виглядає так:

Передбачається, що мережа для розподілу поживних речовин має довжину циркуляції L , яка в трьох вимірах обслуговує приблизно L^3 сайти, куди поживні речовини доставляються капілярами.

- Транспортні мережі по суті створюють додатковий (внутрішній) розмір L , тоді ефективна щільність $\rho_{\text{eff}} \propto M / L^4$. Якщо ρ_{eff} є сталою, то $M \propto L^4$ або $L \propto M^{1/4}$.

Загальна швидкість метаболізму пропорційна кількості обслуговуваних сайтів, тобто, $R \propto L^3 \propto M^{3/4}$.



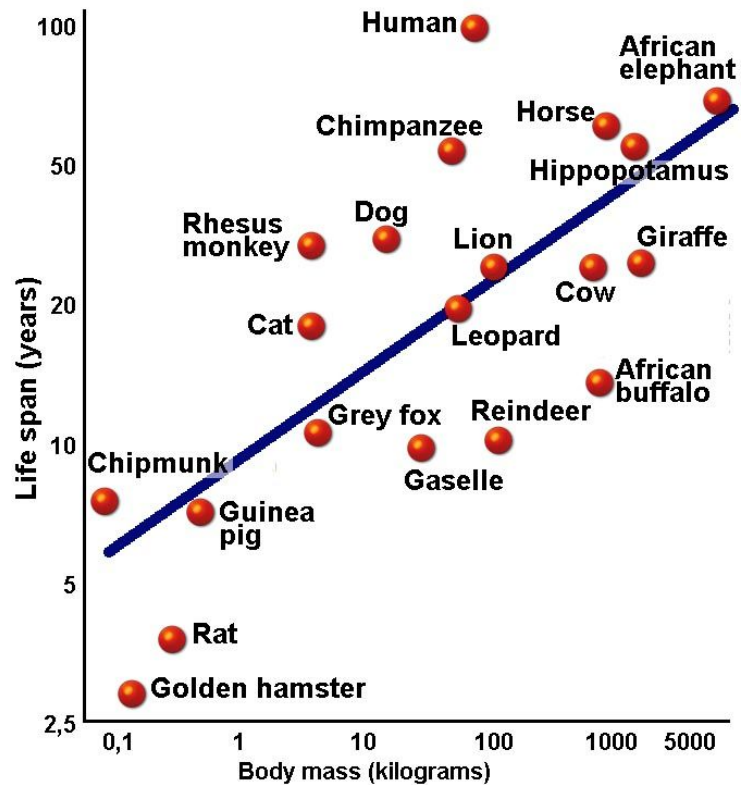
МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ

Існує більш загальний степеневий закон $1/4$, застосовний до багатьох фізіологічних змінних y , як показано на малюнках 4, 5.

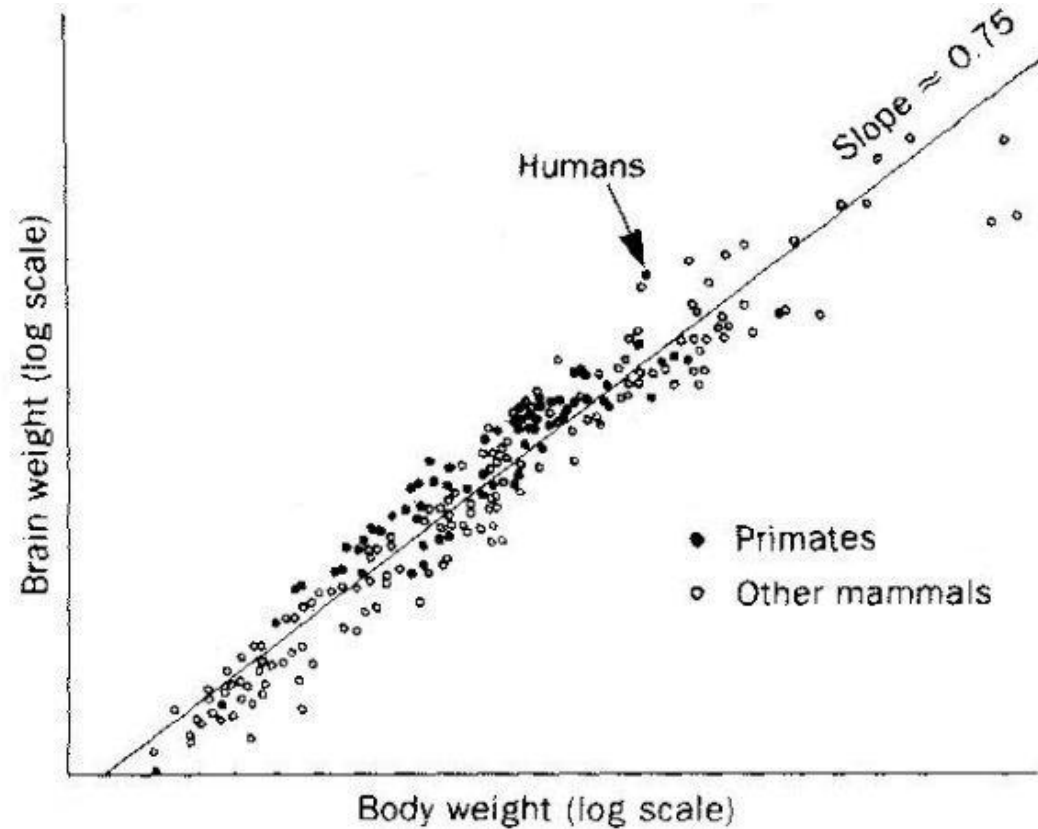
Загальна форма степеневого закону така: y пропорційно M^b , де b є кратним $1/4$.

Здається, що всі ці фізіологічні змінні мають щось спільне з мережами розподілу поживних речовин і розмірною залежністю. Наприклад, тривалість життя пропорційна лінійному розміру L , а частота серцевих скорочень пов'язана з оберненим L^{-1} . Інші змінні просто відповідають тому ж степеневому закону $3/4$ або $L^{3/4}$, що й у випадку швидкості метаболізму.

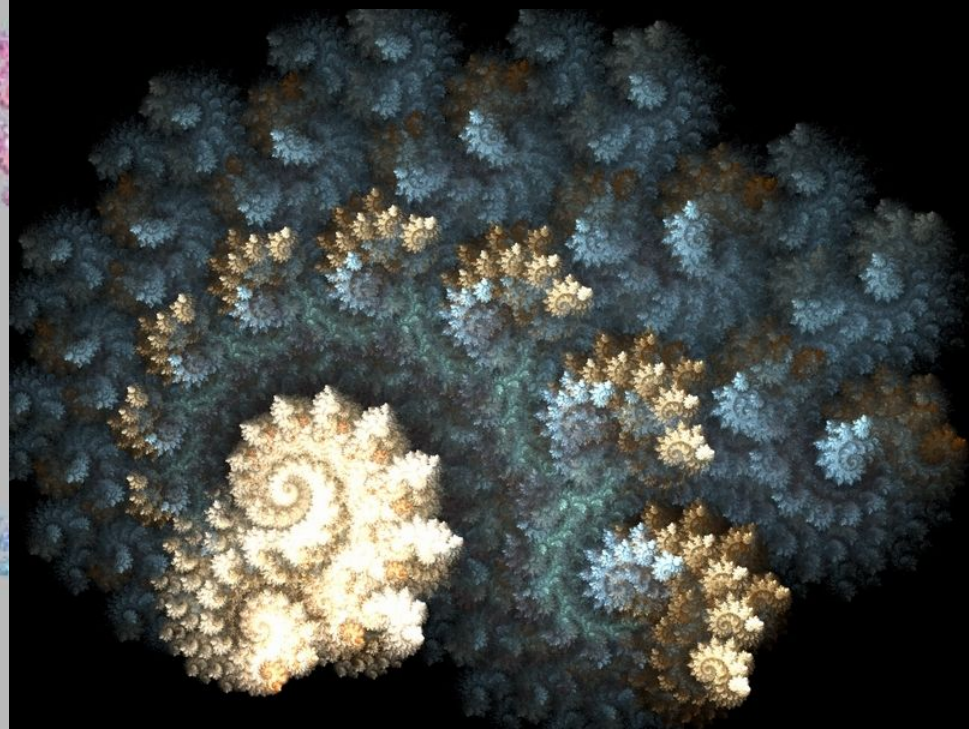
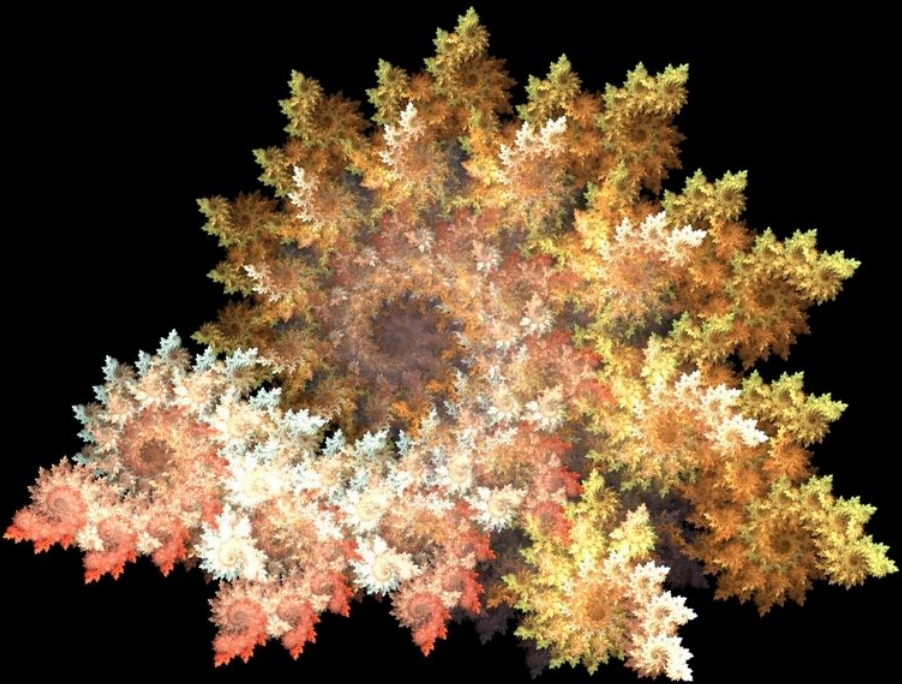
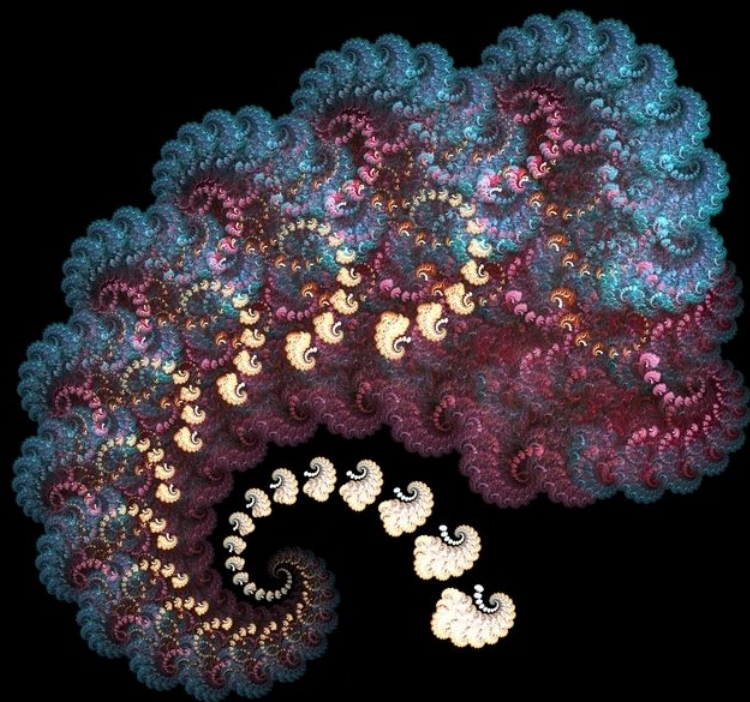
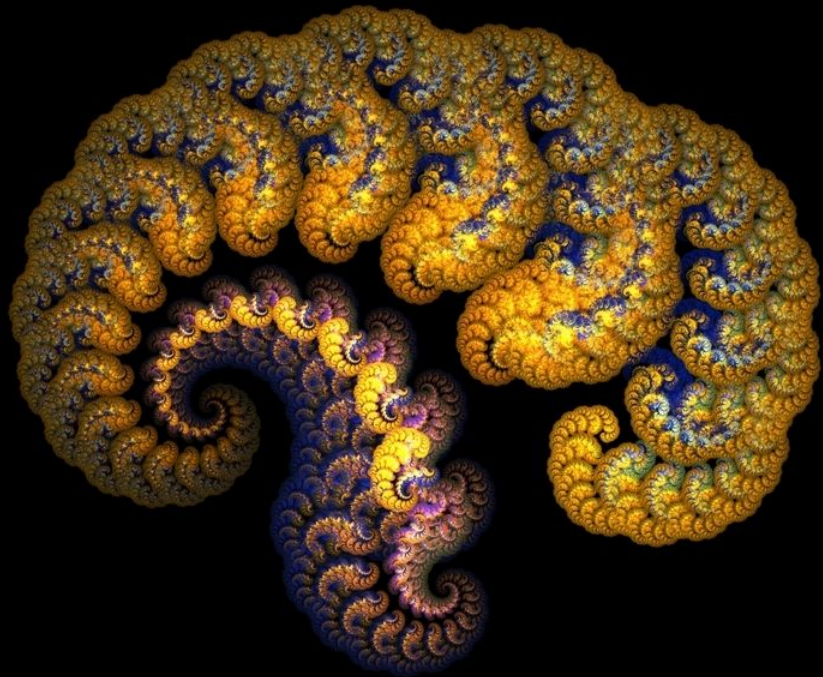
МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В БІОЛОГІЇ



Малюнок 4



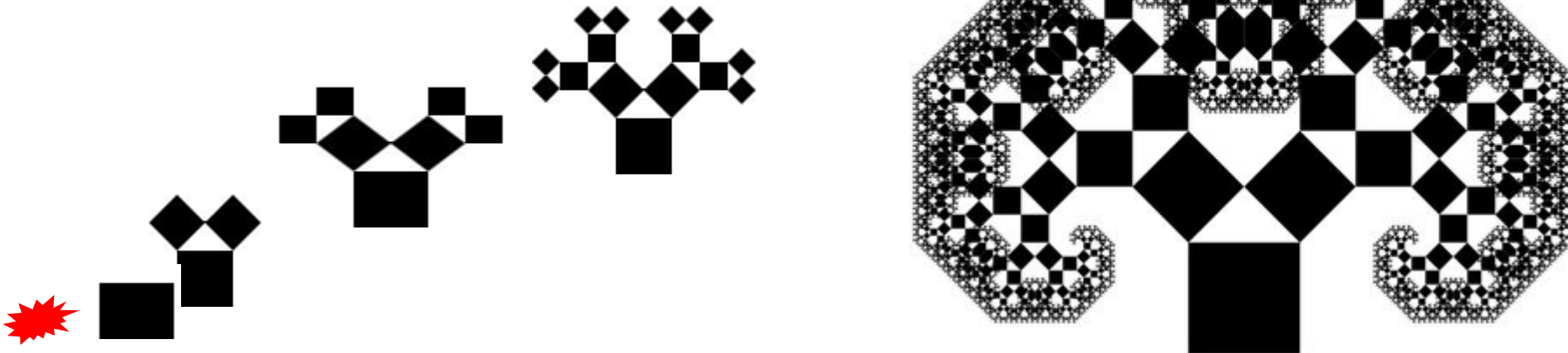
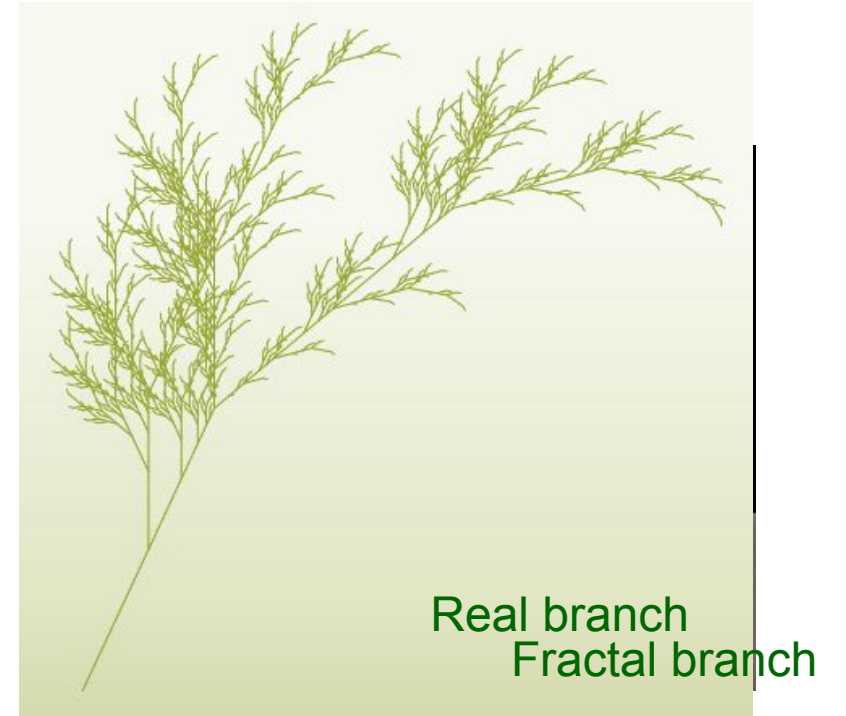
Малюнок 5



Все, що ви бачили, це структури, в основі яких лежать низки фрактальних форм.

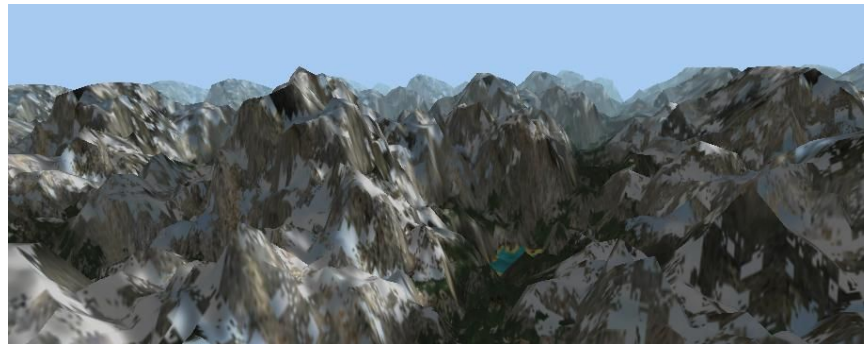
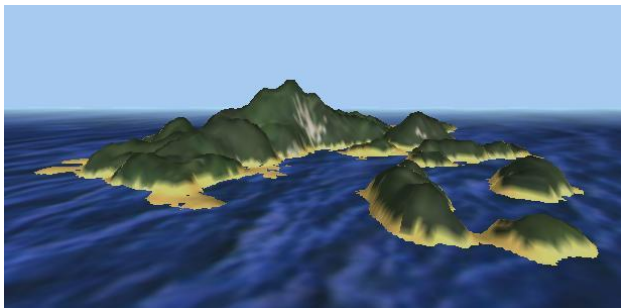
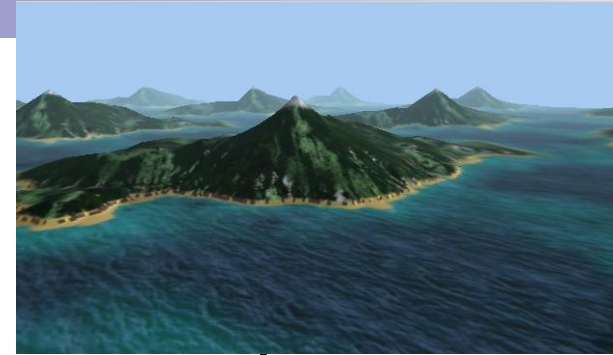
Фрактали - це самоподібні структури:
ціле подібне до своїх частин.

Дивіться: Піфагорове дерево росте поетапно на малюнку внизу.

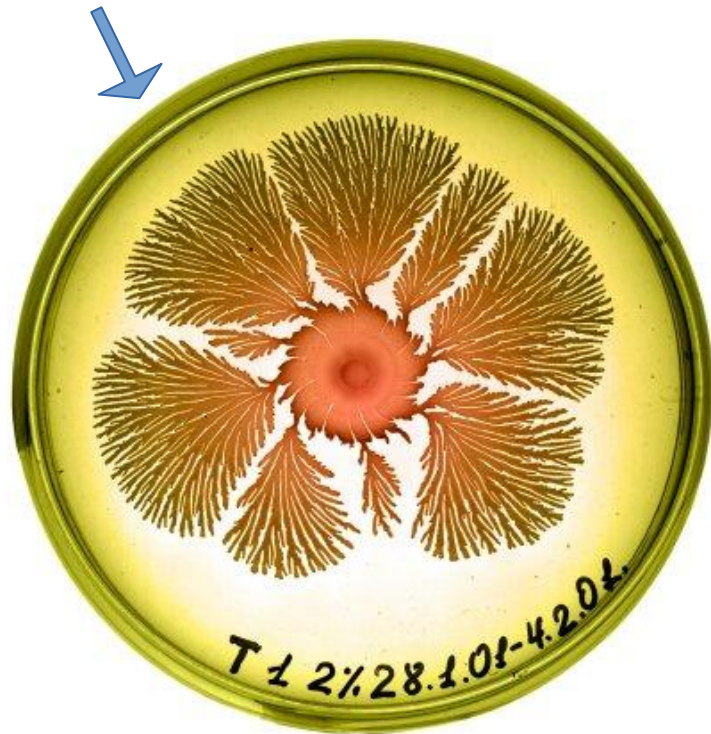


Фрактали

- Усі ландшафти на цих малюнках – майданчики ігор – створені за фрактальним принципом.



Це бактеріальна колонія,
вирощена на агарових чашках у
лабораторії. Незважаючи на те, що
вони штучного кольору, утворені
візерунки все одно дивовижні.



Деякі сорти цвітної капусти або
брокколи мають такі квіткові
паростки з очевидною
математичною красою.

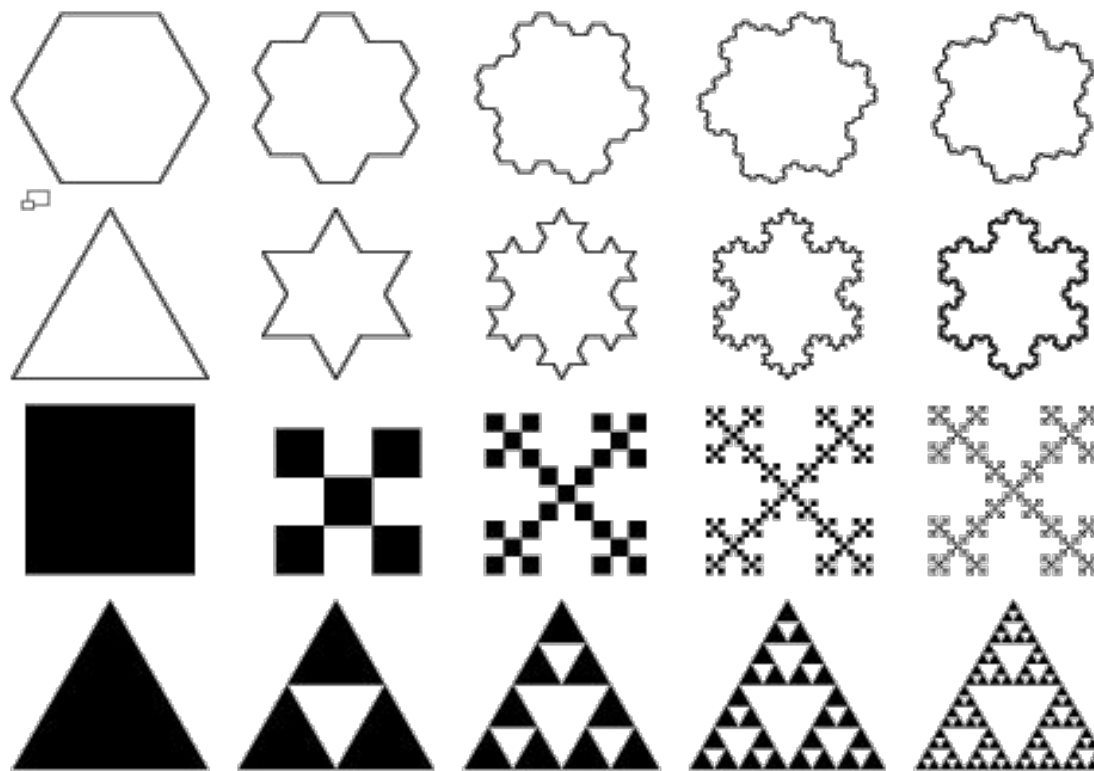
Фрактали складають широку групу моделей – математичних описів реальних природних об'єктів.

Існують складні моделі з точки зору отриманих результатів, але всі вони прості у порівнянні з природними реальними об'єктами.

Сучасна наука базується на моделюванні.

Фрактали

Фрактал — це об'єкт або величина, яка демонструє самоподібність у дещо технічному сенсі в усіх масштабах. Об'єкт **не обов'язково** має однакову структуру на всіх масштабах, але однаковий «тип» структур повинен з'являтися на всіх масштабах.



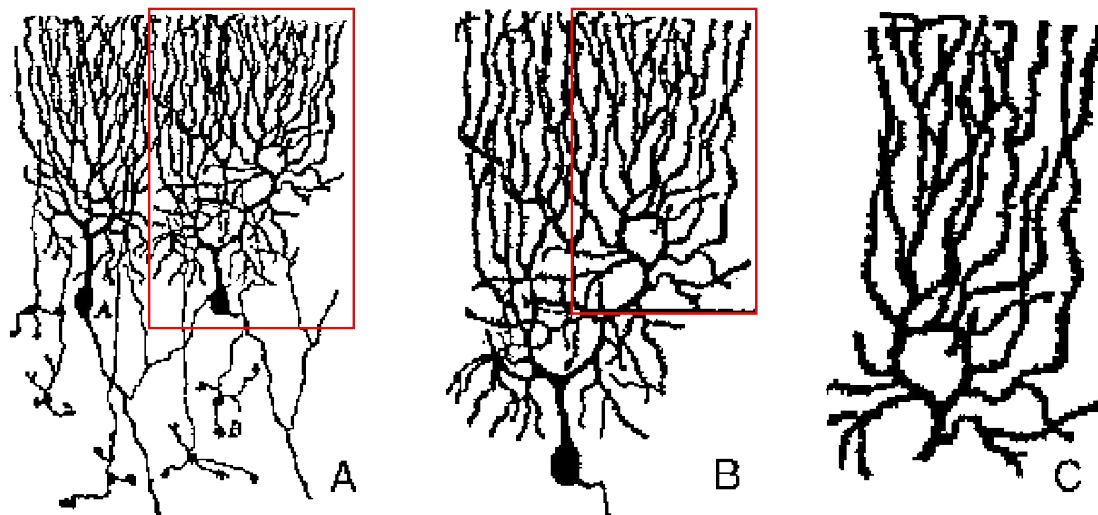
Вище показано фрактали, відомі як: острів Госпера, сніжинка Коха, коробчастий фрактал, трикутник Серпінського.

ГЕОМЕТРИЗАЦІЯ ТЕОРІЇ МОЗКУ

Складну крону дендритного дерева можна математично прирівняти до простих евклідових геометричних примітивів (циліндрів) за умови, що роздвоєння гілок слідує «правилу трьох половин» Ралла; тобто діаметр «материнської гілки» R і діаметр «дочірніх гілок» r підкорявся потужності розгалуження $n=3/2$:

$$R^{3/2} = r_1^{3/2} + r_2^{3/2}$$

Самоподібність – ріст нейронів



Основний принцип фракталів, що ціле подібне до своїх частин, чудово продемонстровано для класичних забарвлених Гольджі клітин Пуркіньє (Кахал, 1911).

Подібність арборизації (формування деревоподібної структури) окремих клітин показана на А (показані схеми двох клітин Пуркіньє). Відокремлена клітина Пуркіньє показана на В, де гілочка у верхньому правому куті обрамлена.

Ця збільшена частина (С) демонструє якісну подібність арборизації всього нейрона (В). Це помітно, незважаючи на обмеження та недоліки, притаманні використанню малюнків класичного матеріалу, пофарбованого Гольджі.

Такі структури називають квазі-фрактальними.

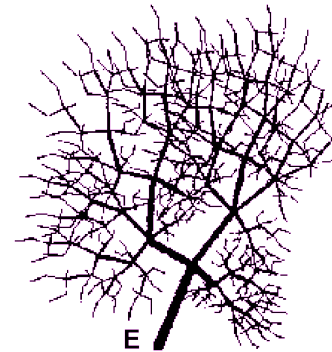
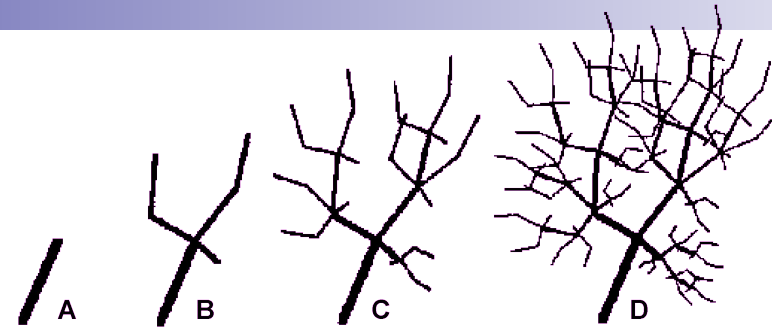
Самоподібність – ріст нейронів

Доцільність фрактальних моделей для зменшення та водночас збереження складних арборизацій.

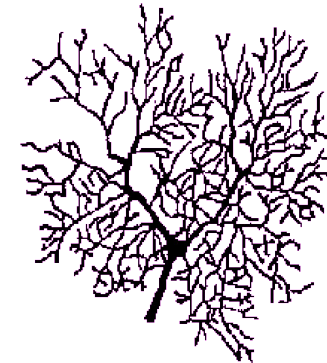
A-D показують початковий стовбур і три наступні стадії фрактального зростання дерева, використовуючи «просторовий код», показаний на B.

Порівняння B і C добре ілюструє «техніку L-системи перезапису рядків»; дендритні гілки, замінені фрактально пропорційним цілим «кодом».

Фрактальне дерево четвертого покоління показано на E, яке можна порівняти з реальною дендритною арборизацією клітини Пуркін'є морської свинки, показаною на F.

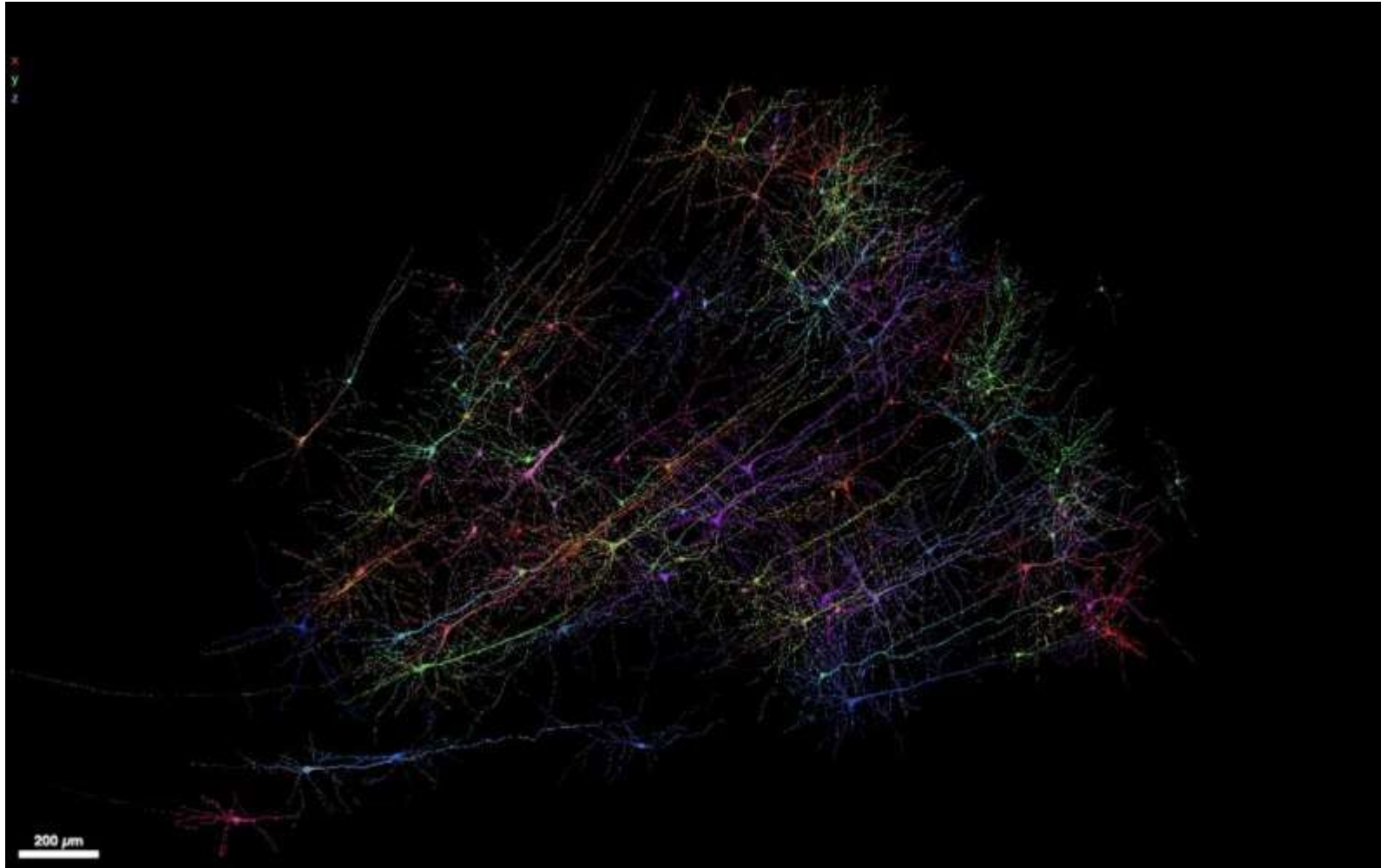


FRACTAL PURKINJE MODEL

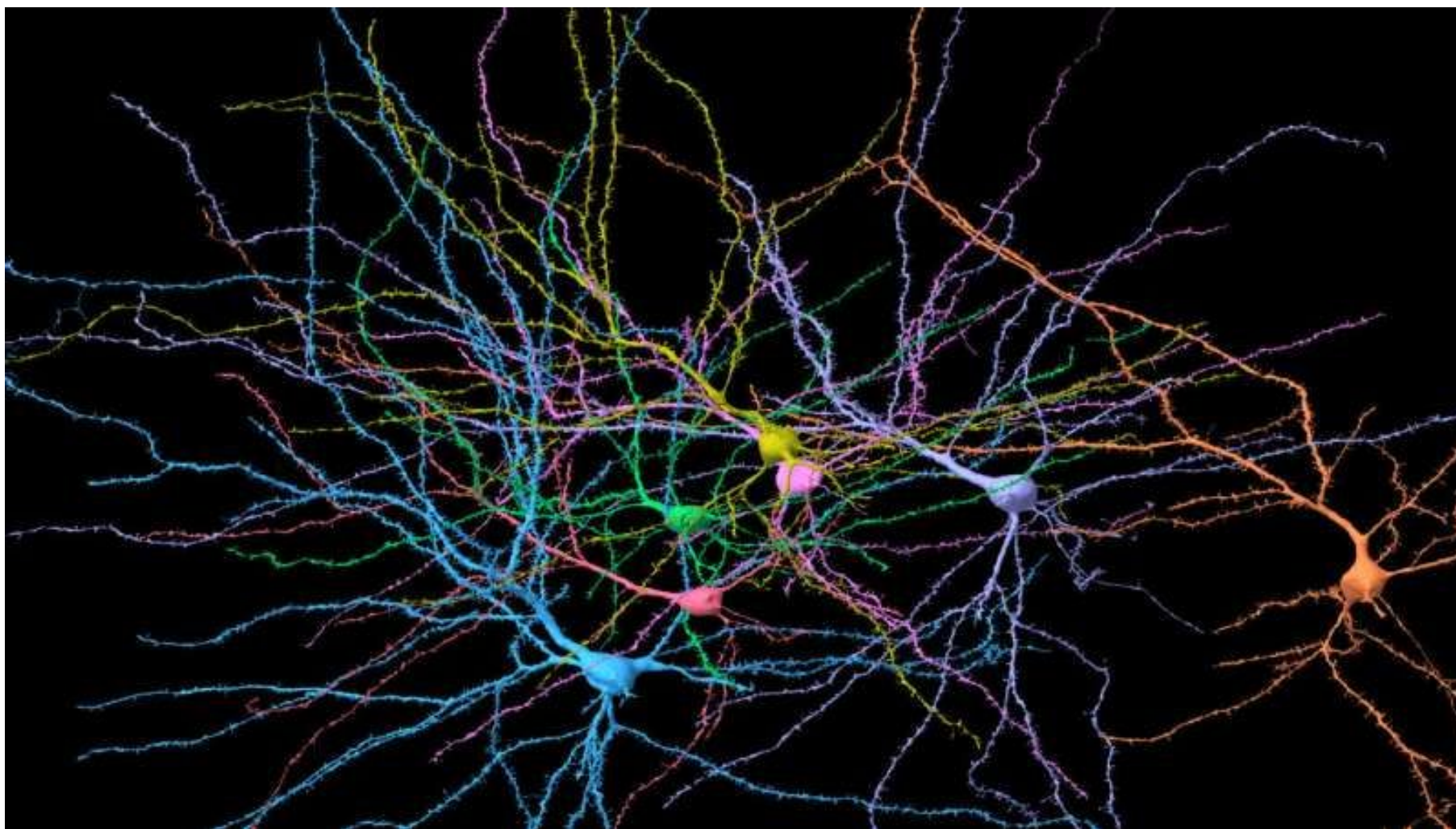


GUINEA PIG PURKINJE CELL

F

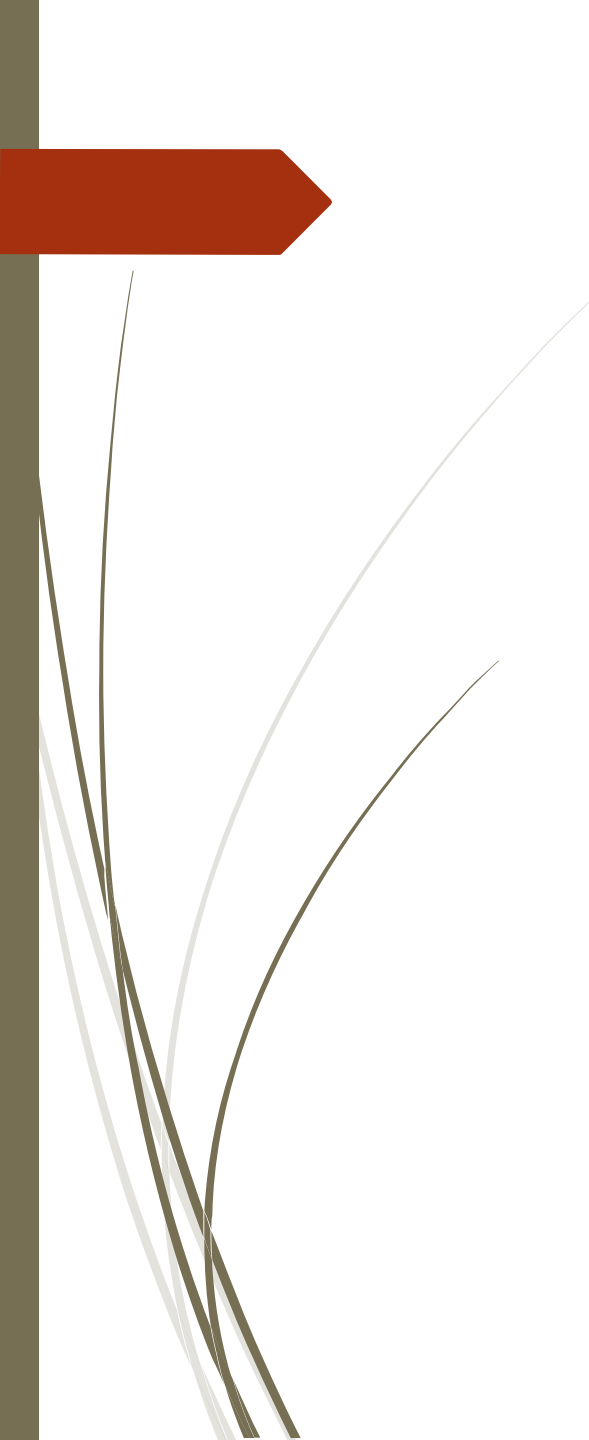


<https://phys.org/news/2024-06-reveals-brain-fractal-phase-transition.html>



Найбільш популярні програмні середовища, придатні для створення різних типів біологічних моделей

1. **MATLAB** — потужне середовище для чисельних обчислень, яке широко використовується в біології для моделювання складних систем. Завдяки своїм можливостям для обробки даних, візуалізації та створення алгоритмів, MATLAB дозволяє проводити експерименти з біологічними моделями.
2. **R** — це мова програмування та середовище для статистичних обчислень і графіків, яка часто використовується для аналізу біологічних даних, статистичного моделювання та візуалізації результатів. Багато пакетів R розроблені спеціально для біоінформатики та екології.
3. **Python**, зокрема з бібліотеками, такими як Biopython, NumPy та SciPy, є популярним вибором для моделювання біологічних систем. Його простота у використанні та велика кількість доступних бібліотек роблять його ідеальним для досліджень у біології.
4. **SimBiology** — це інструмент для MATLAB, який спеціалізується на моделюванні та симуляції біологічних систем, таких як метаболічні шляхи та фармакокінетичні моделі. Це середовище дозволяє створювати моделі з графічним інтерфейсом.
5. **CellDesigner** — програмне забезпечення для моделювання та візуалізації біологічних систем, яке дозволяє створювати графічні моделі метаболічних і сигнальних шляхів, що підтримує обмін даними.
6. **NetLogo** — середовище для агентського моделювання, яке дозволяє досліджувати складні системи з багатьма взаємодіючими агентами. Воно часто використовується в екології для моделювання популяцій і екосистем.
7. **Vcell** (Virtual Cell) — це програмне забезпечення для моделювання клітинних процесів, яке дозволяє досліджувати динаміку молекул у клітинному середовищі. VCell підтримує моделювання як детермінованих, так і стохастичних процесів. Ці програмні середовища забезпечують широкий спектр для дослідження біологічних процесів, що дозволяє науковцям створювати точні моделі, проводити моделювання та аналізувати результати.



Комп'ютерне моделювання знаходить широке застосування в різних галузях біології. Наприклад, у медицині моделі використовуються для прогнозування розвитку захворювань та оцінки ефективності лікування. У екології моделі допомагають вивчати вплив змін клімату на біорізноманіття. Комп'ютерне моделювання стало незамінним інструментом у сучасній біології, дозволяючи науковцям отримувати нові знання про живі системи та їх взаємодії.

Дякую за увагу!

