

Министерство науки и высшего образования РФ
Иркутский национальный исследовательский технический университет

Н.П. Тигунцева

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Лабораторный практикум

Издательство
Иркутского национального исследовательского
технического университета
2026

Оглавление

Семестр №1

Лабораторная работа №1	4
Построение плана эксперимента.....	4
Лабораторная работа №2	5
Моделирование научного эксперимента, оптимизация факторов воздействия при биосинтезе БАВ	5
Лабораторная работа №3	7
Моделирование и оптимизация при составлении сбалансированных рецептов.....	7
Лабораторная работа №4	9
Аппроксимация и статистический анализ экспериментальных данных при культивировании микроорганизмов	9
Лабораторная работа №5	10
Компьютерное моделирование и оптимизация технологических.....	10
процессов	10
Лабораторная работа №6	14
Метод Монте-Карло в поиске решений задач для прогнозирования урожайности биомассы микроводорослей	14
Лабораторная работа №1	17
Компьютерное моделирование молекулярных структур продуктов	17
биосинтеза с помощью программы химик.ру.....	17
Лабораторная работа №2	19
Компьютерные технологии в научном эксперименте	19
Лабораторная работа №3	22
Компьютерные технологии при сборе и предварительной обработке	22
информации	22
Лабораторная работа №4	24
Компьютерные технологии при проектировании и конструировании	24
Лабораторная работа №5	25
Решение задач математического моделирования в биотехнологии с помощью Mathcad.....	25
Лабораторная работа №6	27

Работа с макросами в MS Excel для обработки биотехнологических.....	27
данных.....	27
Лабораторная работа №7	28
Компьютерное моделирование биотехнологических процессов с помощью VBA в MS Excel	28
Лабораторная работа №8	31
Компьютерные технологии при переводе текстов.....	31
Лабораторная работа №9	33
Формирование информационных баз данных	33
Лабораторная работа №10	35
Работа с нейросетями и создание презентаций	35

Семестр №1

Лабораторная работа №1

Построение плана эксперимента

Цель работы – построить и проанализировать линейную регрессионную модель по данным ПФЭ типа 2^2 — проверить воспроизводимость опытов, рассчитать коэффициенты регрессии и сделать выводы на основе полученных результатов.

Задания выполняются в соответствии с индивидуальными вариантами, приведенными ниже.

1

25,40	26,63	24,66
59,76	59,54	57,72
47,40	47,23	46,17
82,07	78,17	81,11

2

28,21	29,58	27,39
66,37	66,13	64,11
52,64	52,45	51,28
91,15	86,82	90,09

3

5,04	5,28	4,89
11,85	11,81	11,45
9,40	9,37	9,16
16,28	15,50	16,09

4

2,52	2,64	2,45
5,93	5,90	5,72
4,70	4,68	4,58
8,14	7,75	8,04

5

2,29	2,40	2,23
5,39	5,37	5,21
4,28	4,26	4,17
7,41	7,05	7,32

6

29,16	31,62	33,66
72,89	71,16	75,80
59,22	59,73	57,64
95,08	99,11	101,75

7

19,41	21,05	22,41
48,53	47,37	50,47
39,42	39,76	38,37
63,30	65,98	67,74

8

9,71	10,52	11,20
24,26	23,69	25,23
19,71	19,88	19,19
31,65	32,99	33,87

9

4,85	5,26	5,60
12,13	11,84	12,62
9,86	9,94	9,59
15,83	16,49	16,93

10

4,42	4,79	5,10
11,04	10,78	11,48
8,97	9,05	8,73
14,40	15,01	15,41

11

5,33	5,70	6,01
11,95	11,69	12,39
9,88	9,96	9,64
15,31	15,92	16,32

12

3,46	3,70	3,91
7,77	7,60	8,05
6,42	6,47	6,27
9,95	10,35	10,61

13

14,99	15,86	14,51
34,98	34,13	33,61
26,02	26,13	26,11
46,21	46,42	48,43

14

8,82	9,33	8,54
20,58	20,08	19,77
15,31	15,37	15,36
27,18	27,31	28,49

15

8,2	8,7	7,9
19,9	19,4	19,1
14,7	14,7	14,7
26,5	26,7	27,8

16

7,4	7,9	7,2
18,1	17,7	17,4
13,3	13,4	13,4
24,1	24,3	25,3

17

4,83	5,13	4,66
11,79	11,49	11,31
8,67	8,71	8,70
15,69	15,77	16,47

18

2,85	3,01	2,75
6,64	6,48	6,38
4,94	4,96	4,95
8,77	8,81	9,19

Номер варианта соответствует номеру студента в списке группы. Вариант задания представляет собой результаты ПФЭ типа 2^2 . В ходе эксперимента в каждой точке факторного пространства проводились три параллельных

опыта. Порядок проведения опытов соответствует матрице эксперимента, представленной в таблице 1.

Таблица 1

Матрицами планирования ПФЭ типа 2^2

N	x_1	x_2	y
1	-	-	y_1
2	+	-	y_2
3	-	+	y_3
4	+	+	y_4

В ходе выполнения индивидуального задания требуется по предложенным экспериментальным данным построить регрессионные линейные модели и провести регрессионный анализ построенных моделей.

Для этого необходимо:

- построить матрицу планирования экспериментов;
- проверить воспроизводимость опытов;
- рассчитать оценки коэффициентов регрессионного уравнения;
- провести анализ результатов и сделать выводы.

Контрольные вопросы

1. В чем сущность планирования эксперимента? Поясните разницу между активным и пассивным экспериментом.
2. Какие задачи решает теория планирования эксперимента?
3. Что такое факторы и какие требования к ним предъявляются? Как выбрать уровни варьирования факторов?
4. Какие требования предъявляются к факторам?
5. Какую область описывает уравнение регрессии, полученное с помощью ПФЭ и в каких границах его можно использовать?
6. Как рассчитать оценки коэффициентов регрессионного уравнения?

Лабораторная работа №2

Моделирование научного эксперимента, оптимизация факторов воздействия при биосинтезе БАВ

Цель работы – построить математическую модель процесса биосинтеза БАВ и определить оптимальные условия культивирования продуцента для максимального выхода целевого продукта.

Исходные данные:

Объект исследования: культура *Streptomyces spp.* — продуцент антибиотика (целевого БАВ).

Факторы воздействия и их уровни:

1. **Концентрация углерода в среде (X_1):**
 - нижний уровень: 10 г/л;
 - верхний уровень: 30 г/л.

2. **рН среды (X_2):**
 - нижний уровень: 5,5;
 - верхний уровень: 7,5.
3. **Температура культивирования (X_3):**
 - нижний уровень: 25 °С;
 - верхний уровень (+1): 35 °С.

Отклик (параметр оптимизации): выход БАВ, мг/л.

Задание

1. Построить матрицу планирования ПФЭ типа 2^3 с тремя параллельными опытами в каждой точке факторного пространства. Заполнить таблицу с кодированными и натуральными значениями факторов.
2. Проверить воспроизводимость опытов в каждой точке плана с помощью критерия Кохрена ($G_{расч} \leq G_{табл}$). При обнаружении неоднородности дисперсии — выявить и исключить грубые ошибки, повторить измерения.
3. Рассчитать коэффициенты линейного уравнения регрессии вида:
$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3$$
где Y — выход БАВ, X_i — кодированные значения факторов, b_i — коэффициенты регрессии.
4. Проверить статистическую значимость коэффициентов с помощью t-критерия Стьюдента.
5. Провести оптимизацию процесса на основе полученной модели:
 - построить поверхности отклика для пар факторов (например, X_1 и X_2 при фиксированном X_3) с помощью программного обеспечения (Excel, Statistica);
 - определить комбинацию уровней факторов, обеспечивающую максимальный выход БАВ;
 - провести подтверждающий эксперимент в оптимальных условиях и сравнить результат с предсказанием модели.
6. Проанализировать влияние факторов и указать, какие факторы и их взаимодействия наиболее сильно влияют на выход БАВ.

Контрольные вопросы

1. Что означает обозначение ПФЭ типа 2^3 и как оно связано с числом опытов в эксперименте?
2. Для чего проводится проверка воспроизводимости опытов и какой статистический критерий для этого применяется?
3. Какой метод используется для расчёта коэффициентов линейного уравнения регрессии и в чём его суть?
4. В чём состоит ограничение ПФЭ типа 2^3 при моделировании сложных биотехнологических процессов?

Лабораторная работа №3

Моделирование и оптимизация при составлении сбалансированных рецептов

Цель работы – разработать математическую модель и оптимизировать состав питательной среды для максимального выхода бактериоцина при культивировании *Bacillus subtilis* с использованием методов планирования эксперимента и регрессионного анализа.

Исходные данные:

Объект: культура *Bacillus subtilis* — продуцент бактериоцина (целевой БАВ).

Факторы состав питательной среды:

- источник углерода (глюкоза): 10–30 г/л;
- источник азота (пептон): 5–15 г/л;
- фосфаты (K_2HPO_4): 1–3 г/л.

Отклик: выход бактериоцина, мг/л.

Задание

1. Построить матрицу планирования ПФЭ типа 2^3 с тремя параллельными опытами в каждой точке факторного пространства. Заполнить таблицу 2 с кодированными и натуральными значениями факторов.

Таблица 2

Матрица планирования ПФЭ типа 2^3

№ опыта	Кодированные значения			Натуральные значения			Выход бактериоцина, мг/л			Средний выход, мг/л
	Глюкоза (X_1)	Пептон (X_2)	K_2HPO_4 (X_3)	X_1 , г/л	X_2 , г/л	X_3 , г/л	Y_1	Y_2	Y_3	
1	-1	...		10	...					$Y_{\text{ср.1}}$
2	+1			30						$Y_{\text{ср.2}}$
3	-1			10						$Y_{\text{ср.3}}$
4	+1			30						$Y_{\text{ср.4}}$
5	-1			10						$Y_{\text{ср.5}}$
6	+1			30						$Y_{\text{ср.6}}$
7	-1			10						$Y_{\text{ср.7}}$
8	+1			30						$Y_{\text{ср.8}}$

Примечание: значения выхода бактериоцина (Y_1 , Y_2 , Y_3) и средние значения (Y) заполняются на основе данных, предоставленных преподавателем.

2. Указать выход бактериоцина для каждого опыта (данные предоставляет преподаватель).

3. Рассчитать коэффициенты линейного уравнения регрессии вида:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3$$

где Y — выход бактериоцина, X_i — кодированные значения факторов, b_i — коэффициенты регрессии.

4. Проверить значимости коэффициентов с помощью t-критерия Стьюдента ($\alpha=0,05$):

- Рассчитать дисперсию воспроизводимости для каждой точки факторного пространства по формуле (1):

$$S_i^2 = \frac{\sum_{k=1}^3 (Y_{ik} - \bar{Y}_i)^2}{2}, \quad i = 1, \dots, 8 \quad (1)$$

- Проверить однородность дисперсий с помощью критерия Кохрена.
- Рассчитать общую дисперсию воспроизводимости по формуле (2):

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^8 S_i^2}{8} \quad (2)$$

- Рассчитать дисперсию оценки коэффициентов по формуле (3):

$$S_b^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{3 \cdot 8} = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{24} \quad (3)$$

- Рассчитать t-статистику для каждого коэффициента по формуле (4):

$$t_j = \frac{|b_j|}{S_b}, \quad j = 0, 1, \dots, 123 \quad (4)$$

- Сравнить с табличным значением

$t_{\text{табл}}(\alpha = 0,05; f = 16)$. Если $t_j > t_{\text{табл}}$, коэффициент значим.

5. Провести оптимизацию процесса на основе полученной модели:

- построить поверхности отклика для пар факторов (например, X_1 и X_2 при фиксированном X_3) с помощью программного обеспечения (Excel, Statistica);
- определить комбинацию уровней факторов, обеспечивающую максимальный выход бактериоцина;

Контрольные вопросы

1. Что такое ПФЭ? В чём его преимущества для биотехнологических процессов?
2. Как кодируются факторы в планировании эксперимента и зачем это нужно?
3. Зачем нужны параллельные опыты в планировании эксперимента? Как они влияют на точность результатов?
4. Как интерпретировать коэффициент b_0 в уравнении регрессии для задачи оптимизации питательной среды?

Лабораторная работа №4

Аппроксимация и статистический анализ экспериментальных данных при культивировании микроорганизмов

Цель работы – сформировать знания, умения и навыки у обучающихся по аппроксимации экспериментальных данных биотехнологических процессов линейной и нелинейной функциями, оценке адекватности моделей и их применению для прогнозирования биотехнологических показателей.

Исходные данные: результаты эксперимента по культивированию штамма *Lactococcus lactis* для производства бактериоцинов. В ходе опытов варьировали концентрацию лактозы (субстрат) в питательной среде (г/л) и измеряли выход бактериоцина (мг/л):

Таблица 3

Экспериментальные данные по выходу бактериоцина в зависимости от концентрации лактозы в питательной среде

Концентрация лактозы, г/л (X)	Выход бактериоцина, мг/л (Y)
5	12
10	28
15	45
20	58
25	65
30	68
35	70

Задание

1. Постройте график зависимости выхода бактериоцина от концентрации лактозы (диаграмма рассеяния). Визуально оцените характер зависимости (линейный/нелинейный).
2. Аппроксимируйте данные:
 - линейной функцией: $Y=a \cdot X+b$;
 - квадратичной функцией: $Y=a \cdot X^2+b \cdot X+c$.
3. Для каждой модели:
 - рассчитайте коэффициенты с помощью метода наименьших квадратов (используйте инструменты Excel, Python, MATLAB или Statistica);
 - постройте линии тренда на графике из п.1;
 - вычислите коэффициент детерминации R^2 ;
 - оцените среднеквадратичную ошибку MSE.
4. Проведите статистическую проверку адекватности моделей:
 - сравните значения R^2 и MSE для линейной и квадратичной моделей;
 - выполните F-критерий Фишера (статистический тест для проверки гипотез, основанный на сравнении дисперсий) для проверки значимости различия между моделями;
 - сделайте вывод о том, какая модель лучше описывает экспериментальные данные.

5. Используйте лучшую модель для прогнозирования:
 - рассчитайте ожидаемый выход бактериоцина при концентрации лактозы 22 г/л и 40 г/л;
 - оцените достоверность прогноза (укажите доверительный интервал при $p=0,95$).
6. Проанализируйте результаты и ответьте на вопросы:
 - при какой концентрации лактозы достигается максимальный выход бактериоцина согласно квадратичной модели? Соответствует ли это биологическим ограничениям процесса?
 - какие факторы, не учтённые в модели, могут влиять на выход бактериоцина?
7. Оформите отчёт, включающий:
 - исходные данные и график с линиями тренда;
 - расчёты коэффициентов и статистических показателей;
 - выводы о выборе оптимальной модели и её применимости для прогнозирования;
 - краткий анализ ограничений использованного подхода.

Контрольные вопросы

1. Какой метод используют для расчёта коэффициентов аппроксимирующих функций?
2. Что показывает коэффициент детерминации R^2 и как его интерпретировать?
3. Что означает меньшее значение MSE для одной из моделей?
4. Для чего применяют F-критерий Фишера при сравнении регрессионных моделей?
5. Как по квадратичной модели определить концентрацию субстрата, обеспечивающую максимальный выход продукта?

Лабораторная работа №5

Компьютерное моделирование и оптимизация технологических процессов

Цель работы – освоить методы компьютерного моделирования и оптимизации технологических процессов на примере теплообменника типа «смешение-смешение»; определить оптимальные параметры работы аппарата (поверхность теплообмена F и расход хладагента G_2) при заданной тепловой нагрузке Q .

Основным вопросом, который приходится рассматривать при проектировании теплообменных аппаратов, является выбор величины поверхности теплообмена F и соответствующей ей нагрузки по хладагенту G_2 при заданной тепловой нагрузке на теплообменник Q . В связи с этим для экономической оценки эффективности теплообменника заданной конструкции может быть

использован критерий оптимальности, объединяющий переменные F и G_2 . Постановка задачи оптимизации будет основываться на математической модели теплообменника типа «смешение-смешение».

Математическая модель и ее анализ

Критерий оптимальности R представляет собой суммарные затраты на эксплуатацию теплообменника в единицу времени и может быть записан в виде:

$$R = St \cdot G_2 + Sf \cdot F \text{ или } R = Rt + Rf \quad (5)$$

где St - стоимость единицы массы хладагента; Sf стоимость единицы поверхности теплообмена, $Rt = Sf \cdot G_2$ эксплуатационные затраты, $Rf = Sf F$ - капитальные затраты.

Для того чтобы получить возможность использовать критерий оптимальности R для выбора оптимальной поверхности теплообмена $F_{\text{опт}}$ и оптимальной величины расхода хладагента $G_{2\text{опт}}$, необходимо из уравнений математического описания теплообменника найти связь между переменными F и G_2 .

Запишем уравнение общего теплового баланса теплообменника:

$$G_1 \cdot C_{F_1} \cdot (T_{10} - T_{1k}) = G_2 \cdot C_{F_2} \cdot (T_{2k} - T_{20}) \quad (6)$$

Получение уравнение запишем относительно переменной

$$T_{2k}(G_2) = T_{20} + \frac{G_1 \cdot C_{F_1}}{G_2 \cdot C_{F_2}} \cdot (T_{10} - T_{1k}) \quad (7)$$

Запишем выражение теплового баланса второго теплоносителя (хладоагента) с учетом источника тела:

$$G_2 \cdot C_{F_2} \cdot (T_{20} - T_{2k}) + k \cdot F \cdot (T_{10} - T_{1k}) = 0 \quad (8)$$

Полученное уравнение запишем относительно переменной F :

$$F = \frac{G_2 \cdot C_{F_2}}{k} \cdot \frac{(T_{2k} - T_{20})}{(T_{1k} - T_{2k})} \quad (9)$$

Таким образом, получим систему уравнений, определяемые переменные которой являются функциями расхода хладагента G_2 . Решение задачи оптимизации сводится к определению такого значения расхода $G_2 = G_{2\text{опт}}$, при котором функция суммарных затрат имеет минимум $R(G_2)$.

$$\begin{aligned}
1. \quad T_{2k}(G_2) &= T_{20} + \frac{G_1 \cdot C_{R1}}{G_2 \cdot C_{R2}} \cdot (T_{10} - T_{1k}) \\
2. \quad F(G_2) &= \frac{G_2 \cdot C_{R2}}{k} \cdot \frac{(T_{2k} - T_{20})}{(T_{1k} - T_{2k})} \\
3. \quad Rt(G_2) &= St \cdot G_2 \\
4. \quad Rf(G_2) &= Sf \cdot F \\
5. \quad R(G_2) &= Rt + Rf
\end{aligned}
\tag{10}$$

При нахождении минимума функции $R(G_2)$ необходимо учитывать следующие ограничения.

Расход хладагента G_2 и поверхность теплообменника F могут принимать значения только больше нуля. Конечная температура хладагента T_2 , не может быть больше конечной температуры первого теплоносителя T_{1k} .

Большое значение для сходимости итерационного процесса решения задачи оптимизации имеет правильный выбор начального значения переменной G_2 . Из уравнения 1 следует предварительно определить, при каких значениях G_2 , конечная температура хладагента T_{2k} , становится больше конечной температуры первого теплоносителя T_{1k} , что физически невозможно. Поэтому начальное приближение для переменной G_2 , должно быть принято больше этого значения.

Решение задачи оптимизации в программе Excel

Решение задачи оптимизации представлено на рисунке 1.

В блоке ячеек A3:12 вводятся параметры модели.

В ячейке B15 введено начальное приближение для переменной $G_2=3$.

В блоке ячеек B17:B21 записана система уравнений математического описания теплообменника (таблица 4)

Таблица 4

Система уравнений математического описания теплообменника

Ячейка	Математическая формула
B17	$T_{2k} = T_{20} + \frac{G_1 \cdot C_{R1}}{G_2 \cdot C_{R2}} \cdot (T_{10} - T_{1k})$
B18	$F = \frac{G_2 \cdot C_{R2}}{k} \cdot \frac{(T_{2k} - T_{20})}{(T_{1k} - T_{2k})}$
B19	$Rt = St \cdot G_2$
B20	$Rf = Sf \cdot F$
B21	$R = Rt + Rf$

Решение осуществляется с помощью надстройки **Поиск решения**. Заполнение полей диалогового окна Поиск решения показано на рис.1.

В блоке ячеек A29:435 эта же задача решается методом табулирования функций.

В блоке ячеек A29:A35 введены значения расхода C_2 от 3 до 9 кг/с.

В ячейках B29:F29 решаются уравнения математического описания (табл. 5).

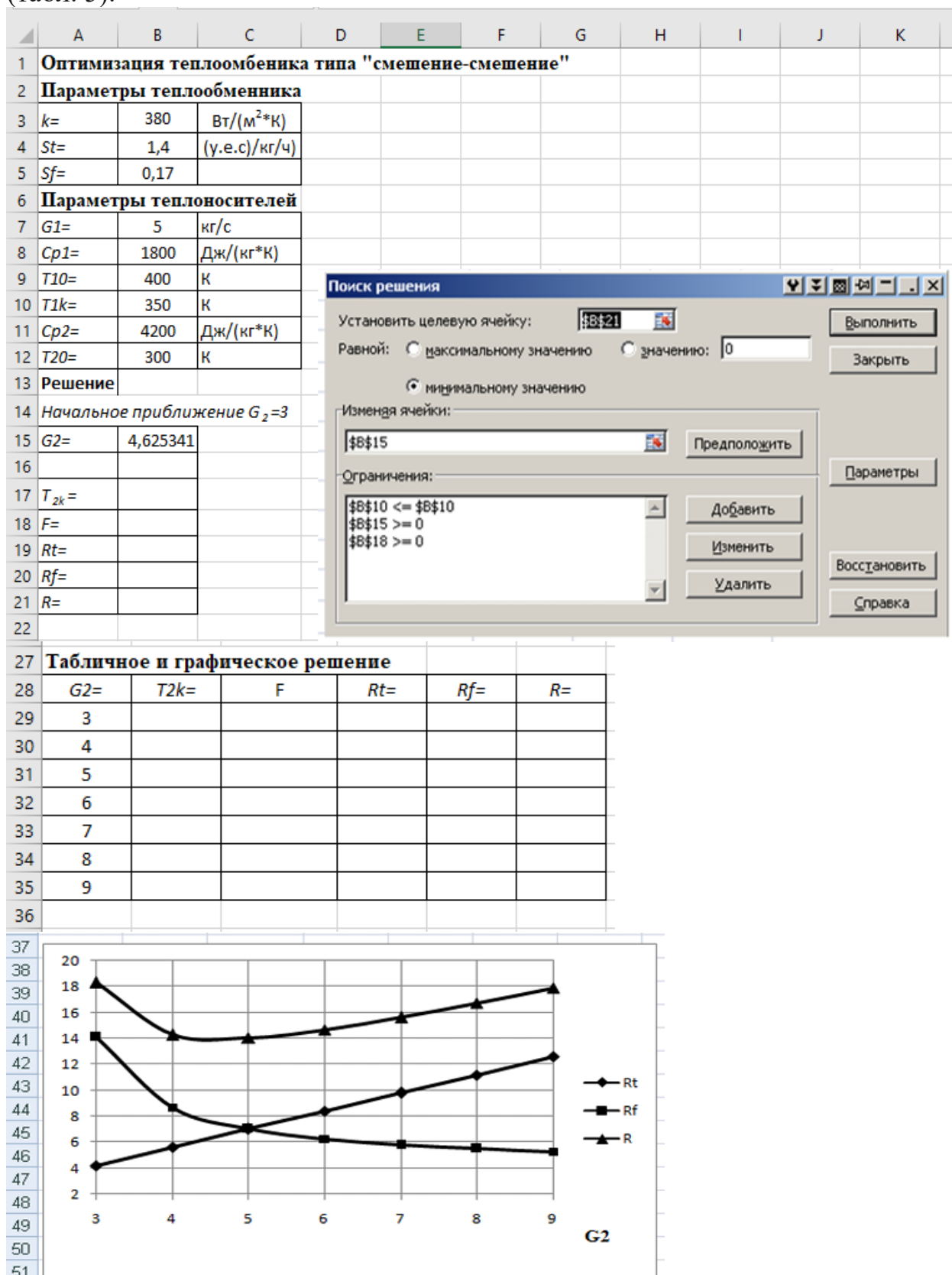


Рисунок 1 – Решение задачи оптимизации

Таблица 5

Система уравнений математического описания теплообменника

Ячейка	Математическая формула
B29	$T_{2k} = T_{20} + \frac{G_1 \cdot C_{P_1}}{G_2 \cdot C_{P_2}} \cdot (T_{10} - T_{1k})$
C29	$F = \frac{G_2 \cdot C_{P_2}}{k} \cdot \frac{(T_{2k} - T_{20})}{(T_{1k} - T_{2k})}$
D29	$Rt = St \cdot G_2$
E29	$Rf = Sf \cdot F$
F 29	$R = Rt + Rf$

Ячейки B29:F29 копируются вниз до строки 35 методом протаскивания за маркер автозаполнения.

По значениям в блоке ячеек A29:A35; D29:F35 строится Точечный график.

Контрольные вопросы

1. Какова цель оптимизации теплообменника в данной работе — что требуется минимизировать?
2. Какие два ключевых параметра подлежат оптимизации в модели теплообменника?
3. Как математически выражается связь между тепловой нагрузкой Q , площадью теплообмена F и температурным напором $\Delta T_{ср}$?
4. Назовите два ограничения из области допустимых решений, связанных с физическими характеристиками системы.

Лабораторная работа №6**Метод Монте-Карло в поиске решений задач для прогнозирования урожайности биомассы микроводорослей**

Цель работы – освоить метод Монте-Карло для моделирования биотехнологических процессов в программе Excel; оценить диапазон возможной урожайности биомассы микроводорослей *Chlorella vulgaris* при варьируемых условиях культивирования.

Исходные данные: при культивировании микроводорослей на фото-биореакторах урожайность биомассы зависит от ряда факторов с естественной вариабельностью:

- освещённость (варьируется в диапазоне 80–120 % от номинала);
- температура среды (22–28 °C);
- концентрация CO₂ (1–3 %);
- начальная плотность клеток (0,5–1,5 г/л).

Требуемая урожайность: $\geq 2,5$ г/(л·сутки).

Задание

1. Подготовьте таблицу исходных данных с параметрами на листе Excel

Таблица 6

Исходные данные с параметрами для культивирования микроводорослей

Параметр	Минимальное значение	Максимальное значение	Номинальное значение (ср.зн.)
Освещённость, %	80	120	100
Температура, °C	22	28	25
Концентрация CO ₂ , %	1	3	2
Начальная плотность клеток, г/л	0,5	1,5	1,0

2. Задайте параметры модели роста (модифицированное уравнение Моно) формула (11):

$$\mu = \frac{\mu_{\max} \cdot S}{K_s + S} \cdot f(I) \cdot f(T) \quad (11)$$

где μ — удельная скорость роста, S — концентрация лимитирующего субстрата, $\mu_{\max}$ и K_s — параметры модели, $f(I)$ и $f(T)$ — функции влияния освещённости и температуры;

- $\mu_{\max} = 0,8$ сут⁻¹;
- $K_s = 0,2$ г/л;
- формула урожайности: $Y = \mu \cdot X_0$, где X_0 — начальная плотность клеток.

3. Создайте новый лист для симуляции по методу Монте-Карло, для этого:

- в столбцах A–D сгенерируйте случайные значения для каждого параметра (5 000 строк):

- Столбец A (Освещённость): `=СЛУЧМЕЖДУ(80;120)`

- Столбец B (Температура): `=СЛУЧМЕЖДУ(22;28)`

- Столбец C (CO₂): `=СЛУЧМЕЖДУ(100;300)/100` (для получения значений 1,0–3,0 %)

- Столбец D (Плотность клеток): `=СЛУЧМЕЖДУ(50;150)/100` (для значений 0,5–1,5 г/л)

- В столбце E рассчитайте удельную скорость роста μ :
 $=0,8 * D2 / (0,2 + D2)$,

где D2 — значение начальной плотности клеток в текущей строке.

- В столбце F рассчитайте урожайность Y:

$$=E2 * D2$$

4. Проведите статистический анализ результатов

- На отдельном листе Анализ результатов выполните расчёты:

- Среднее значение урожайности: `=СРЗНАЧ(Симуляция Монте-Карло!F:F)`;

- стандартное отклонение: `=СТАНДОТКЛОН.С(Симуляция Монте-Карло!F:F)`;

- минимальное значение: `=МИН(Симуляция Монте-Карло!F:F)`;

- максимальное значение: `=МАКС(Симуляция Монте-Карло!F:F)`.

5. Рассчитайте вероятность достижения требуемой урожайности ($\geq 2,5$ г/(л·сут)):

$$=СЧЁТЕСЛИ(Симуляция Монте-Карло!F:F;">=2,5")/5000$$

Результат отформатируйте как процент.

6. Постройте гистограмму распределения урожайности:

- выделите столбец F на листе Симуляция Монте-Карло;
- перейдите в Вставка → Диаграммы → Гистограмма;
- настройте количество интервалов (например, 20).

7. Оцените чувствительность метода. Отфильтруйте строки с экстремальными значениями урожайности:

- высокая урожайность ($> 3,0$ г/(л·сут));
- низкая урожайность ($< 1,5$ г/(л·сут)).
- Сравните средние значения освещённости, температуры, CO_2 и плотности клеток для этих групп.

- Сделайте вывод: какой параметр сильнее всего влияет на урожайность?

8. Оптимизируйте условия культивирования

- сузьте диапазоны двух наиболее критичных параметров на 20 % в сторону благоприятных значений: например, температура: 24–26 °C; концентрация CO_2 : 1,6–2,4 %.
- Обновите формулы генерации случайных чисел в столбцах B и C.
- Пересчитайте урожайность (столбцы E и F).
- На листе Анализ результатов сравните вероятность достижения $\geq 2,5$ г/(л·сут) до и после оптимизации.

9. Оформите отчет. На листе Отчет представьте сводную таблицу 7

Таблица 7

Сводная таблица оптимизации

Показатель	До оптимизации	После оптимизации
Средняя урожайность, г/(л·сут)		
Стандартное отклонение		
Вероятность успеха ($\geq 2,5$ г/(л·сут)), %		

Гистограммы урожайности (до и после оптимизации) — разместите рядом для сравнения.

10. Приведите краткие выводы (3–4 предложения):

- какой параметр оказался наиболее критичным?
- удалось ли повысить вероятность успеха за счёт оптимизации?
- каковы практические рекомендации для культивирования *Chlorella vulgaris*?

Контрольные вопросы

1. В чём суть метода Монте-Карло для моделирования биопроцессов?
2. Зачем в Excel делить результат СЛУЧМЕЖДУ на 100 при генерации значений CO₂ и плотности клеток?
3. Что означает вероятность достижения урожайности $\geq 2,5$ г/(л·сут) (например, 43%) в контексте симуляции?
4. Как среднее значение, стандартное отклонение и диапазон (мин/макс) урожайности помогают оценить риски низкой продуктивности? Кратко поясните роль каждого показателя.
5. Почему сужение диапазонов ключевых параметров (на 20 %) может повысить вероятность успеха, даже если их средние значения не изменились? Приведите краткий пример (1–2 предложения) для температуры или CO₂.

Семестр №2

Лабораторная работа №1

Компьютерное моделирование молекулярных структур продуктов биосинтеза с помощью программы химик.ру

Цель работы – освоить базовые инструменты программы «Химик.ру» для моделирования и анализа молекулярных структур — от аминокислот до исследования взаимодействия антибиотика с биологической мишенью.

Исходные данные:

1. Базовые молекулярные структуры (отдельные аминокислоты) — для построения и оптимизации 3D-моделей.

2. Структурная формула и данные о молекуле тетрациклина (включая длины связей, валентные углы, пространственную конфигурацию) — для моделирования и анализа ключевых параметров.

3. Структурные данные участка бактериальной рибосомы (3D-модель или координаты ключевых остатков) — для исследования взаимодействия с тетрациклином.

4. Литературные данные о:

- структурных характеристиках тетрациклина;
- механизме его антибактериального действия;
- особенностях взаимодействия тетрациклина с рибосомой — для сопоставления с расчётными результатами.

Задание:

1. Работа с аминокислотами.

1.1 Запустите программу «Химик.ру».

1.2 Выберите из встроенной библиотеки 3 различные аминокислоты (например, глицин, аланин, лизин).

1.3 Для каждой аминокислоты:

- постройте 2D-структуру по химической формуле;
- преобразуйте 2D-структуру в 3D-модель с помощью функции автоматического построения;

• выполните геометрическую оптимизацию структуры методом молекулярной механики (например, MMFF94 или AMBER) — укажите в отчёте выбранный метод;

• измерьте и запишите:

- длины 3 ключевых связей (C–C, C–N, C=O) в Å;
- величины 2 валентных углов (например, N–C–C и C–C=O) в градусах;
- тип и угол диэдрального угла (если применимо).

1.4 Сохраните 3D-модели в формате программы и экспортируйте изображения (PNG/JPEG) для отчёта.

2. Моделирование молекулы тетрациклина

2.1. Загрузите или постройте структуру тетрациклина:

• используйте встроенную библиотеку соединений, если тетрациклин присутствует;

• либо постройте структуру вручную по известной формуле.

2.2 Проведите полную геометрическую оптимизацию молекулы выбранным методом молекулярной механики (например, MMFF94 или AMBER) — зафиксируйте параметры расчёта.

2.3 Проанализируйте оптимизированную структуру:

- выделите и отметьте функциональные группы, важные для биологической активности (фенольные OH, диметиламиногруппа и т.д.);
- измерьте длины связей и углы в ароматических кольцах и сравните с литературными данными;

2.4 Визуализируйте заряды на атомах.

2.5 Сохраните оптимизированную структуру для отчёта.

3. Первичный анализ взаимодействия тетрациклина с рибосомой

3.1 Импортируйте упрощённую модель участка бактериальной рибосомы (фрагмент рРНК или белок, связывающий тетрациклин) — используйте готовую структуру из базы данных программы или загрузите PDB-файл.

3.2 Расположите молекулу тетрациклина рядом с ними вручную.

3.3 Измерьте расстояние между атомами тетрациклина нуклеотидов.

3.4 Проанализируйте возможные контакты:

- отметьте водородные связи между тетрациклином и остатками рибосомы (запишите расстояния $O \dots H-N$ и $N \dots H-O$ в Å);
- оцените гидрофобные контакты (расстояние между атомами $\geq 3,5$ Å);
- визуализируйте ключевые взаимодействия.

3.5 Кратко сопоставьте полученные данные с литературными сведениями о механизме действия тетрациклина.

4. Подготовьте краткий отчёт (1–2 страницы), включающий:

- таблицу с измеренными параметрами для аминокислот (длины связей, углы);
- изображение структуры тетрациклина с отмеченными функциональными группами и картой МЭП;
- скриншот комплекса «тетрациклин–рибосома» с выделенными водородными связями;
- вывод: 2–3 предложения о соответствии расчётных данных известным биохимическим свойствам тетрациклина.

Контрольные вопросы

1. Перечислите основные этапы моделирования молекулярных структур в химик.ру.

2. Какие геометрические параметры нужно измерить для оптимизированной структуры аминокислоты и зачем?

3. Как в химик.ру визуализировать заряды на атомах тетрациклина и как это связано с его активностью?

4. Как в «Химик.ру» преобразовать 2D-структуру аминокислоты в 3D-модель и зачем нужна последующая оптимизация? Кратко опишите шаги.

5. Какие функциональные группы в структуре тетрациклина критически важны для его антибактериального действия — и как их можно выделить в программе?

Лабораторная работа №2

Компьютерные технологии в научном эксперименте

Цель работы — освоить применение электронных таблиц Excel в качестве элемента АСНИ для мониторинга и анализа роста микробной культуры в биореакторе: от сбора данных до прогнозирования динамики роста.

Исходные данные: таблица с измерениями за 8 часов культивирования *Escherichia coli* с интервалом 30 минут. Значения смоделированы с учётом биологических закономерностей роста культуры.

Таблица 8

Данные мониторинга роста *E. coli* в биореакторе

Время (ч)	OD ₆₀₀ (оптическая плотность)	Температура (°C)	pH	DO (концентрация растворённого кислорода, %)
0	0,05	37,0	7,20	90
0,5	0,06	37,1	7,18	88
1,0	0,07	36,9	7,15	85
1,5	0,09	37,0	7,12	82
2,0	0,12	37,2	7,08	78
2,5	0,18	37,1	7,05	75
3,0	0,26	37,0	7,02	70
3,5	0,38	37,4	6,98	65
4,0	0,55	37,0	6,95	60
4,5	0,78	37,2	6,92	55
5,0	1,05	37,1	6,88	48
5,5	1,32	37,0	6,85	42
6,0	1,55	37,1	6,82	38
6,5	1,70	37,0	6,80	35
7,0	1,78	37,2	6,78	33
7,5	1,82	37,1	6,75	32
8,0	1,83	37,0	6,73	31

Задание

1. Создайте таблицу с колонками: «Время (ч)», «OD₆₀₀», «Температура», «pH», «DO».

- Введите данные таблицы 8.
- Постройте совмещённый график: Перейдите на вкладку «Вставка» → «Рекомендуемые диаграммы» → «Комбинированная».

- Для рядов:
- «OD₆₀₀» и «DO (%)» выберите тип «График», поставьте галочку «Вспомогательная ось».
- «Температура (°C)» и «pH» оставьте как «График» на основной оси.
- Нажмите «ОК».

2. Рассчитайте удельную скорость роста (μ). Добавьте колонку «Удельная скорость роста, μ ». В ячейке C2 (для первого расчёта) введите формулу: $=\text{LN}(B3/B2)/(A3-A2)$

где: В — колонка OD₆₀₀; А — колонка времени; LN — функция натурального логарифма.

Протяните формулу вниз по всем строкам.

Найдите максимальное значение $\mu_{\max}$ с помощью функции `=МАКС(С:С)`.

3. Добавьте колонку «OD фильтрованный». Используйте функцию `СРЗНАЧ` для расчёта среднего по 3–5 соседним точкам: `СРЗНАЧ(B2:B6)`. Постройте график сравнения исходного и отфильтрованного OD.

4. Определите фазы роста. Проанализируйте график μ :

- лаг-фаза — $\mu \approx 0$;
- экспоненциальная фаза — $\mu = \mu_{\max}$;
- стационарная фаза — $\mu \rightarrow 0$.

Отметьте границы фаз на графике с помощью вертикальных линий (вставка → фигуры) или добавьте столбец-маркер.

5. Постройте точечную диаграмму OD и время. Добавьте линию тренда (ПКМ на точках → «Добавить линию тренда»). Выберите тип:

- экспоненциальный (для экспоненциальной фазы);
- логистический (если есть стационарная фаза, вручную задайте параметры).

Отобразите на графике:

- уравнение тренда;
- коэффициент детерминации R^2 .

Используйте уравнение для прогноза OD через 2 часа: подставьте новое значение времени в формулу тренда.

6. Перейдите в «Данные» → «Анализ данных» → «Корреляция».

- Укажите диапазон данных (OD, pH, DO, T).
- Получите матрицу корреляций.
- Интерпретируйте результаты:
 - $|r| > 0,7$ — сильная связь;
 - $0,3 < |r| < 0,7$ — умеренная связь;
 - $|r| < 0,3$ — слабая связь.

7. Сформируйте лист «Отчёт» с: таблицей ключевых параметров ($\mu_{\max}$, время лаг-фазы, R^2); графиками из п. 1 и 5; выводом: «Оптимальная фаза сбора биомассы наступает через ____ часов после инокуляции». Сохраните файл как PDF («Файл» → «Сохранить как» → тип файла PDF).

Контрольные вопросы

1. Какие фазы роста микробной культуры выделяют по динамике μ ?
2. Как в Excel создать комбинированную диаграмму с двумя осями Y?
3. Для чего применяют скользящее среднее в обработке данных?
4. Что означает коэффициент детерминации R^2 на графике тренда?
5. Какие значения коэффициента корреляции r соответствуют сильной, умеренной и слабой связи?

Лабораторная работа №3

Компьютерные технологии при сборе и предварительной обработке информации

Цель работы – освоить методы статистической обработки экспериментальных данных и оценки существенности различий между выборками с использованием компьютерных технологий на примере Microsoft Excel.

Исходные данные: изучается два варианта режима клонального микро-размножения оздоровленных растений картофеля *in vitro*: 1 – среда Мурасиге-Скуге (MS). 2- среда Гамборга (B5). Изучаемый признак высота столба на 21 день, см.

Таблица 9

Независимые выборки

Среда Мурасиге-Скуга (вариант 1)					Среда Гамборга (вариант 2)				
Номера колонок					Номера колонок				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
15,6	12,4	10,2	8,0	9,4	17,8	13,5	12,5	13,0	12,4
14,4	10,6	11,0	9,8	8,8	16,6	14,2	13,6	14,4	13,7
13,9	9,3	8,1	9,1	7,4	17,0	15,5	10,4	12,8	14,3
16,0	13,4	9,7	7,3	10,4	15,6	14,5	11,8	12,0	14,5
14,9	12,6	7,6	10,0	6,5	16,5	13,0	13,9	11,5	12,5
13,3	10,5	8,4	7,5	9,9	17,0	14,3	14,8	12,8	13,7
14,4	10,5	9,0	11,1	9,0	17,1	13,6	11,3	13,5	12,9
10,4	9,0	9,7	10,0	9,6	16,4	12,9	12,5	14,4	14,0
11,1	8,8	9,5	10,3	7,4	19,3	15,4	10,4	15,9	14,5
15,0	9,4	—	8,4	9,4	16,7	13,9	—	11,8	13,4

1. Проведите статистическую обработку двух выборок:
 - Рассчитать основные статистические показатели
 - Определить средние значения
 - Вычислить дисперсию и стандартное отклонение
 - Найти ошибку средней и коэффициент вариации
2. Выполните оценку существенности различий между выборками тремя методами:
 - Интервальным методом
 - По критерию существенности
 - Методом НСР (наименьшей существенной разности)

Порядок выполнения:

1. Первичная обработка данных:
 - Занести данные в рабочую таблицу
 - Рассчитать суммы по каждой выборке
 - Определить количество наблюдений (n)
2. Расчет статистических показателей:
 - Среднее значение ($\bar{x}$)
 - Квадрат суммы (C)
 - Сумма квадратов отклонений (СК)
 - Дисперсия (S²)

- Стандартное отклонение (S)
- Ошибка средней (sx)
- Коэффициент вариации (V)

Оценка существенности разности между средними по вариантам

а) интервальным методом

$$\begin{aligned} \bar{x}_1 \pm t_{0.5} \cdot S_{\bar{x}_1} = & \bar{x}_2 \pm t_{0.5} \cdot S_{\bar{x}_2} = \\ t_{0.5} = & \text{при } df = n-1 \end{aligned}$$

б) по критерию существенности

$$\begin{aligned} t_d = \frac{d}{S_d} = \frac{|\bar{x}_2 - \bar{x}_1|}{\sqrt{S_{\bar{x}_1}^2 + S_{\bar{x}_2}^2}} = \\ t_{0.5} = \quad t_{0.1} = \quad \text{при } df = n_1 + n_2 - 2 = \end{aligned}$$

в) по наименьшей существенной разности (НСР)

$$НСР_{0.5} = t_{0.5} \cdot S_d = \quad НСР_{0.1} = t_{0.1} \cdot S_d =$$

3. Оценка значимости различий:

- Определить критические значения t-критерия
- Рассчитать доверительные интервалы
- Вычислить фактическое значение t
- Найти НСР для уровней значимости 0.05 и 0.01

Таблица 10

Рабочая таблица с формулами для расчета

Статистические показатели	Вариант 1	Вариант 2
$\bar{x} = \frac{\sum X}{n} =$		
$C = \frac{(\sum X)^2}{n} =$		
$CK = \sum (X - \bar{x})^2 = \sum X^2 - C =$		
$S^2 = \frac{\sum (X - \bar{x})^2}{n-1} =$		
$S = \sqrt{S^2} =$		
$s_x = \frac{S}{\sqrt{n}} =$		
$V = \frac{S}{\bar{x}} \cdot 100 =$		

Контрольные вопросы

6. Как рассчитать среднее значение ($\bar{x}$) выборки
7. В чём разница между дисперсией (S^2) и стандартным отклонением (S)? Приведите формулы расчёта для обоих показателей.
8. Что показывает коэффициент вариации (V) и по какой формуле он вычисляется? В каких случаях его использование наиболее целесообразно?
9. В чём суть интервального метода оценки различий между выборками?

Лабораторная работа №4

Компьютерные технологии при проектировании и конструировании

Цель работы – освоить принципы интеграции CAD- и CAM-систем на примере решения задачи: от создания 3D-модели детали до генерации управляющей программы для станка с ЧПУ

Исходные данные:

1. Программное обеспечение:
 - CAD-система для 3D-моделирования (например, КОМПАС-3D, AutoCAD, Нанокad);
 - CAM-модуль или отдельная CAM-система, совместимая с выбранной CAD-системой
2. Техническое задание на деталь: чертёж простой детали с размерами и допусками (например, пластина с пазами и отверстиями).

Задание.

1. 3D-моделирование детали в CAD-системе
 - Откройте CAD-систему и создайте новый файл детали.
 - По предоставленному чертежу постройте 3D-модель детали, соблюдая размеры и допуски.
 - Сохраните модель в формате, поддерживаемом CAM-модулем (например, step, iges).
2. Импорт модели и настройка CAM-проекта

- Импортируйте 3D-модель в САМ-систему.
 - Задайте параметры заготовки (размеры, материал).
 - Выберите станок с ЧПУ из библиотеки системы.
 - Определите операции обработки (черновая фрезеровка, чистовая обработка, сверление).
3. Программирование обработки и симуляция
- Для каждой операции выберите инструмент из библиотеки.
 - Настройте траектории инструмента (тип стратегии, глубина резания, подача).
 - Запустите симуляцию обработки: проверьте отсутствие столкновений и корректность траекторий.
 - При обнаружении ошибок внесите корректировки и повторите симуляцию.
4. Заполните отчёт: опишите этапы работы, укажите возникшие сложности и способы их решения. Сформулируйте краткий вывод (3–4 предложения) о преимуществах интеграции CAD/CAM на примере выполненного задания

Контрольные вопросы

1. Что означает аббревиатура CAD?
2. Что означает аббревиатура CAM
3. Зачем нужна интеграция CAD и CAM? (1 преимущество)
4. Что проверяют при запуске симуляции обработки? (1 пункт)
5. Что является конечным результатом работы в САМ-системе?

Лабораторная работа №5

Решение задач математического моделирования в биотехнологии с помощью Mathcad

Цель работы – освоить базовые функции Mathcad для решения типовых биотехнологических задач: выполнить расчёты кинетики роста микроорганизмов, проанализировать данные ферментации и визуализировать результаты в виде графиков.

Исходные данные:

1. Параметры роста культуры:
 - Начальная концентрация биомассы $X_0 = 0,1$ г/л;
 - максимальная удельная скорость роста $\mu_{\max} = 0,5$ ч⁻¹;
 - константа насыщения $K_s = 0,2$ г/л;
 - концентрация субстрата $S = 5$ г/л.
2. Кинетическая модель Моно:

$$\mu = \frac{\mu_{\max} \cdot S}{K_s + S}$$

Таблица 11

Данные эксперимента по ферментации

Время (ч)	Биомасса (г/л)	Субстрат (г/л)	Продукт (г/л)
0	0,1	5,0	0
4	0,5	4,2	0,1
8	1,8	3,0	0,4
12	3,5	1,5	1,2
16	4,0	0,3	2,5

Задание

1. Рассчитайте удельную скорость роста

- В Mathcad задайте исходные параметры (X_0 , $\mu_{\max}$, K_s , S).
- Реализуйте формулу Моно для расчёта μ .
- Вычислите значение μ для заданных условий.
- Постройте график зависимости μ от S (диапазон S : 0–10 г/л).

2. Проанализируйте экспериментальные данные

- Введите данные таблицы в Mathcad в виде векторов.
- Рассчитайте выход биомассы по субстрату ($Y_{X/S}$) для каждого временного интервала:

$$Y_{X/S} = \frac{\Delta X}{\Delta S} \quad (12)$$

где ΔX — прирост биомассы, ΔS — расход субстрата.

- Найдите среднее значение $Y_{X/S}$.

3. Смоделируйте рост биомассы.

- Составьте уравнение экспоненциального роста:

$$X(t) = X_0 \cdot e^{\mu \cdot t}$$

- Постройте теоретическую кривую роста $X(t)$ для $t=0-16$ ч.
- Наложите на график экспериментальные данные по биомассе.

4. Оформите графики:

- зависимость μ от S ;
- сравнение теоретической и экспериментальной кривых роста;
- динамика потребления субстрата и накопления продукта.

1. Добавьте подписи осей, легенду и заголовок.

2. Проанализируйте расхождения между моделью и экспериментом.

3. Сформулируйте вывод

Контрольные вопросы

1. Какая формула используется для расчёта удельной скорости роста μ по модели Моно?
2. Как в Mathcad задать начальное значение переменной (оператор)?

3. Что означает параметр $Y_{X/S}$ и как он рассчитывается?
4. Какой вид имеет уравнение экспоненциального роста биомассы $X(t)$?

Лабораторная работа №6

Работа с макросами в MS Excel для обработки биотехнологических данных

Цель работы – освоить создание и применение макросов в MS Excel для автоматизации обработки биотехнологических данных.

Исходные данные:

Таблица 12

Результаты ферментации

№ эксперимента	Штамм микроорганизма	Время культивирования, ч	Концентрация биомассы, г/л	Потребление субстрата, г/л	Выход продукта, г/л
1	Strain_A	0	0,1	0	0
1	Strain_A	8	1,8	2,0	0,4
1	Strain_A	16	4,1	4,7	2,5
2	Strain_B	0	0,1	0	0
2	Strain_B	8	2,1	1,9	0,6
2	Strain_B	16	4,2	4,8	2,8
3	Strain_C	0	0,1	0,	0
3	Strain_C	8	1,5	2,2	0,3
3	Strain_C	16	3,3	4,6	2,1

Задание

1. Откройте MS Excel. Создайте новую книгу. Переименуйте первый лист в «Исходные данные».
2. В ячейку **A1** введите: «№ эксперимента».
В ячейку **B1** введите: «Штамм микроорганизма».
В ячейку **C1** введите: «Время культивирования, ч».
В ячейку **D1** введите: «Концентрация биомассы, г/л».
В ячейку **E1** введите: «Потребление субстрата, г/л».
В ячейку **F1** введите: «Выход продукта, г/л».
3. Начиная с ячейки **A2**, введите данные из таблицы выше.
4. Включите режим записи макроса («Разработчик» → «Запись макроса»).
5. Задайте имя макроса (например, `Format_HighYield`).
6. Выполните действия:
 - выделите диапазон данных по выходу продукта;
 - примените условное форматирование: значения > 2 г/л — жёлтая заливка;
 - остановите запись макроса.
7. Проверьте работу макроса на другом наборе данных.
8. Запишите новый макрос (`Calculate_QP`).
9. Добавьте столбец «Удельная продуктивность, г/(л·ч)».

10. В первой ячейке столбца введите формулу расчёта Q_P (используйте ссылки на соседние ячейки).

Расчёт удельной продуктивности

$$Q_P = \Delta P / \Delta t \cdot X_{\text{ср}} \quad (13)$$

где ΔP — прирост продукта, Δt — интервал времени, $X_{\text{ср}}$ — средняя биомасса);

11. Протяните формулу на весь диапазон данных.

12. Остановите запись макроса и протестируйте его на копии таблицы.

13. Автоматизируйте сводный отчет. Для этого:

- Создайте макрос `Create_Summary_Table`.

- Запишите действия по: выделению уникальных штаммов; поиску максимальных значений биомассы и продукта для каждого штамма (функции `МАКС` по условиям); формированию новой таблицы на отдельном листе.

- Настройте макрос для автоматического обновления сводки при изменении исходных данных.

14. Сохраните файл в формате .xlsm (с поддержкой макросов).

Контрольные вопросы

1. Что такое макрос в MS Excel и для чего он используется?
2. Какими способами можно создать макрос в Excel?
3. В каком формате необходимо сохранить файл, чтобы в нём работали макросы?
4. Как применить условное форматирование с помощью макроса (на примере выделения значений > 2 г/л)?
5. По какой формуле рассчитывается удельная продуктивность (Q_P) и какие данные для неё нужны?
6. Какие функции Excel можно использовать в макросе для поиска максимальных значений по условиям (например, макс. биомасса по штаммам)?

Лабораторная работа №7

Компьютерное моделирование биотехнологических процессов с помощью VBA в MS Excel

Цель работы – освоить методы компьютерного моделирования ферментативных процессов на примере кинетики реакции по уравнению Михаэлиса–Ментен с помощью VBA в MS Excel.

Задание.

1. Построить математическую модель ферментативной реакции на основе уравнения Михаэлиса–Ментен.
2. Создать в MS Excel структуру рабочей книги с листами для ввода данных, результатов и графиков.
3. Разработать пользовательскую форму (UserForm) для выбора параметров реакции.

4. Реализовать на VBA алгоритм расчёта скорости реакции в зависимости от концентрации субстрата.

5. Выполнить расчёты для различных значений константы Михаэлиса (K_M) и максимальной скорости (V_{max}).

6. Построить график зависимости скорости реакции от концентрации субстрата (кривая Михаэлиса–Ментен).

7. Проанализировать влияние изменения параметров на ход кинетической кривой.

Порядок выполнения:

1. Запустите MS Excel.

2. Переименуйте листы: Лист 1 → «Входные данные»; Лист 2 → «Результаты расчёта»; Лист 3 → «Графики». На листе «Входные данные» создайте таблицу параметров (см. табл. 13):

Таблица 13

Параметры ферментативной реакции

Параметр	Обозначение	Ячейка	Значение
Максимальная скорость реакции, мкмоль/мин	V_{max}	B3	10,0
Константа Михаэлиса, мМ	K_M	B4	2,0
Диапазон концентраций субстрата, мМ (от–до)	[S]	B5:C5	0,1-10,0
Шаг изменения концентрации, мМ	ΔS	B6	0,2

3. Создайте пользовательскую форму (UserForm). Для этого:

1. Откройте редактор VBA: «Разработчик» → «Visual Basic» (или нажмите Alt+F11).

2. Добавьте новую форму: Insert → UserForm.

3. Настройте свойства формы: Caption: «Кинетика ферментативной реакции».

4. Добавьте элементы управления: Frame с Caption = «Параметры реакции»; внутри рамки:

- TextBox для ввода V_{max} , подпись — Label « V_{max} , мкмоль/мин:»;
- TextBox для ввода K_M , подпись — Label « K_M , мМ:»;
- TextBox для шага концентрации, подпись — Label «Шаг ΔS , мМ:»;
- CommandButton с Caption = «Рассчитать»;
- CommandButton с Caption = «Построить график»;
- CommandButton с Caption = «Выход».

5. Программирование макросов. Добавьте модуль: Insert → Module. Введите код для запуска формы:

```
Sub Ферментативная Кинетика()  
    UserForm1.Show  
End Sub
```

6. Назначьте макрос «Ферментативная Кинетика» кнопке на листе «Входные данные»:

- На вкладке «Разработчик» → «Вставить» → «Элементы управления формы» → «Кнопка».
- Нарисуйте кнопку на листе, назовите «Запуск расчёта».
- Правой кнопкой мыши → «Назначить макрос» → выберите «Ферментативная Кинетика».

7. Для кнопки «Рассчитать» (CommandButton1) напишите код расчёта по уравнению Михаэлиса–Ментен:

```
Private Sub CommandButton1_Click()  
    Dim Vmax As Double, KM As Double, S As Double  
    Dim stepS As Double, i As Integer  
  
    ' Считываем параметры из формы  
    Vmax = CDBl(TextBox1.Value)  
    KM = CDBl(TextBox2.Value)  
    stepS = CDBl(TextBox3.Value)  
  
    ' Очищаем лист результатов  
    Worksheets("Результаты расчёта").Cells.Clear  
  
    ' Заголовки таблицы  
    Worksheets("Результаты расчёта").Range("A1").Value = "Концентрация субстрата, мМ"  
    Worksheets("Результаты расчёта").Range("B1").Value = "Скорость реакции, мкмоль/мин"  
  
    i = 2  
    For S = 0.1 To 10 Step stepS  
        ' Уравнение Михаэлиса-Ментен:  $v = (V_{\max} * [S]) / (K_M + [S])$   
        Dim v As Double  
        v = (Vmax * S) / (KM + S)  
  
        Worksheets("Результаты расчёта").Cells(i, 1).Value = S  
        Worksheets("Результаты расчёта").Cells(i, 2).Value = v  
        i = i + 1  
    Next S
```

```
MsgBox "Расчёт завершён!"  
End Sub
```

8. Для кнопки «Построить график» напишите код создания диаграммы:

```
Private Sub CommandButton2_Click()  
    Dim chartObj As ChartObject  
    Set chartObj = Worksheets("Графики").ChartObjects.Add(Left:=50,  
Width:=400, Top:=50, Height:=300)  
    With chartObj.Chart  
        SetSourceData Source:=Worksheets("Результаты рас-  
чёта").Range("A:B")  
        .ChartType = xlXYScatterSmooth ' График с плавными линиями  
        .HasTitle = True  
        .ChartTitle.Text = "Кривая Михаэлиса-Ментен"  
    End With  
End Sub
```

9. Для кнопки «Выход» добавьте код закрытия формы:

```
Private Sub CommandButton3_Click()  
    Unload Me  
End Sub
```

Контрольные вопросы

1. Что характеризует константа Михаэлиса K_M ?
2. Почему скорость реакции выходит на плато при высоких концентрациях субстрата?
3. В каких биотехнологических процессах актуально моделирование по уравнению Михаэлиса–Ментен?
4. Какие ещё модели ферментативной кинетики вы знаете?

Лабораторная работа №8

Компьютерные технологии при переводе текстов

Цель работы – освоить современные компьютерные технологии перевода на примере работы с биотехнологическими текстами; научиться оценивать качество перевода и выполнять постредактирование.

Задание

1. Сравните возможности разных инструментов перевода для биотехнологической лексики.
2. Выполните перевод фрагмента научного текста с английского на русский с помощью разных сервисов.
3. Проведите анализ качества перевода и выполните постредактирование.

4. Создайте персональный глоссарий биотехнологических терминов.
5. Освойте основы работы с САТ-инструментами на упрощённом примере.
6. Откройте браузер и зайдите на сайты:
 - ABBY Lingvo Online;
 - Multitran;
 - Google Translate.
7. Кратко запишите в таблицу основные возможности каждого ресурса (табл. 14):

Таблица 14

Сравнение онлайн-инструментов перевода

Инструмент	Количество языков	Специализированные словари (есть/нет)	Дополнительные функции
ABBY Lingvo			
Multitran			
Google Translate			

8. Возьмите для перевода следующий фрагмент (на английском языке):

«In modern biotechnology, recombinant DNA technology enables scientists to insert specific genes into host organisms. This process involves restriction enzymes that cut DNA at precise locations, followed by ligation with DNA ligase. The transformed cells then express the desired protein, such as insulin or growth hormone»

9. Переведите этот текст тремя способами:
 - через ABBY Lingvo (перевод ключевых терминов);
 - через Multitran (с использованием биотехнологического словаря);
 - через Google Translate
10. Сохраните все три варианта перевода в отдельном документе Word (назвав его «Результаты перевода»).
11. Сравните три полученных перевода по критериям (табл.15).

Таблица 15

Оценка качества перевода

Критерий	ABBY Lingvo	Multitran	Google Translate
Точность терминов (1–5)			
Грамматическая правильность (1–5)			
Стилистическая адекватность (1–5)			

Сохранение смысла (1–5)			
Время выполнения (сек)			

12. Выберите лучший вариант и выполните постредактирование — исправьте ошибки, улучшите стиль, сохраните итоговый вариант в том же документе.

13. Создайте глоссарий. Из исходного текста выпишите 8–10 ключевых биотехнологических терминов на английском языке. Найдите их точные русские эквиваленты с помощью словарей и запишите в табл. 16:

Таблица 16

Персональный глоссарий

Английский термин	Русский эквивалент	Источник (словарь)	Пример использования
Recombinant DNA technol- ogy	Технология рекомбинантной ДНК	Multitran	«Технология рекомбинант- ной ДНК ши- роко применя- ется в генной инженерии»
Restriction enzymes	Рестрикционные ферменты	ABBY Lingvo	
...	...	...	

Контрольные вопросы

1. В чём разница между машинным и автоматизированным переводом?
2. Почему для биотехнологических текстов важно использовать специализированные словари?
3. Что такое «постредактирование» и зачем оно нужно?
4. Назовите 2–3 ограничения систем машинного перевода при работе с научными текстами.

Лабораторная работа №9

Формирование информационных баз данных

Цель работы – освоить принципы проектирования и наполнения баз данных на примере биотехнологической предметной области; научиться создавать структуру БД, заполнять её данными и выполнять простые запросы.

Задание

1. Спроектируйте структуру базы данных для учёта лабораторных образцов биотехнологического исследования.
2. Создайте базу данных в СУБД Microsoft Access (или LibreOffice Base).

3. Заполните таблицы тестовыми данными.
4. Выполните запросы для извлечения информации из БД.
5. Проанализируйте возможности использования БД в биотехнологии.

Порядок выполнения:

1. Определите сущности для биотехнологической лаборатории:
 - «Образцы» (ID, название, тип образца, дата получения, источник);
 - «Анализы» (ID, тип анализа, дата проведения, результат, ID_образца);
 - «Реагенты» (ID, название, концентрация, срок годности, поставщик).
2. Для каждой сущности выделите атрибуты и определите типы данных (текстовый, числовой, дата/время и т.д.).
3. Установите связи между таблицами (например, «Образцы» ↔ «Анализы»).
4. Нарисуйте ER-диаграмму
5. Запустите Microsoft Access или LibreOffice Base.
6. Создайте новую базу данных с именем «Биотех_Лаборатория.accdb» («Биотех_Лаборатория.odt»).
7. В режиме конструктора создайте три таблицы согласно спроектированной структуре:
 - задайте поля и типы данных;
 - установите первичные ключи (например, поле ID);
 - настройте связи между таблицами через «Схему данных».
8. Перейдите в режим таблицы и заполните каждую таблицу 8–10 тестовыми записями. Примеры данных:
 - для «Образцов»: штамм *E. coli* K12, культура дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*, образец почвы с поля № 5;
 - для «Анализов»: ПЦР-тест на наличие гена X, измерение оптической плотности культуры, определение концентрации белка;
 - для «Реагентов»: Taq-полимераза (5 ед/мкл), буфер для электрофореза (10×), глюкоза (40 %).
9. Создайте и выполните запросы:
 - Запрос 1: вывести все образцы, полученные после 01.01.2024.
 - Запрос 2: показать результаты ПЦР-анализов для штамма *E. coli*.
 - Запрос 3: найти все реагенты с истёкшим сроком годности (сравните дату в поле «Срок годности» с текущей датой).
10. Сохраните запросы в базе данных под именами «Свежие образцы», «ПЦР *E. coli*», «Просроченные реагенты».
11. Проанализируйте результаты: как такая БД может помочь в работе лаборатории?

Контрольные вопросы

1. Что такое первичный ключ и зачем он нужен в таблице?

2. Как связи между таблицами помогают избежать дублирования данных?
3. Приведите 2–3 примера биотехнологических данных, которые удобно хранить в БД.
4. Чем отличается работа проектировщика БД от работы пользователя?
5. Какие меры безопасности можно внедрить в БД для защиты конфиденциальных биотехнологических данных?

Лабораторная работа №10

Работа с нейросетями и создание презентаций

Цель работы – освоить навыки создания структурированной научной презентации с использованием MS PowerPoint и альтернативного инструмента (Google Slides, Canva и др.).

Задание

1. Выбрать тему из области компьютерного моделирования в биотехнологии и собрать материалы для презентации.
2. Создать презентацию из 8–10 слайдов с использованием выбранного инструмента.
3. Освоить базовые функции программы: шаблоны, форматирование текста, вставка изображений, графиков, схем, анимаций и переходов.
4. Оформить презентацию в едином стиле, соответствующем научному докладу.
5. Подготовить краткие тезисы для устного сопровождения каждого слайда.

Контрольные вопросы

1. Назовите 2–3 программы (помимо MS PowerPoint), в которых можно создать презентацию.
2. Какое оптимальное количество слайдов рекомендуется для 8–10-минутного научного доклада?
3. Какие два ключевых правила следует соблюдать при размещении текста на слайде научной презентации?
4. Почему в научных презентациях рекомендуется использовать минимум анимаций и переходов?