

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра молекулярної та медичної біофізики

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Проректор з науково-педагогічної  
роботи

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### **Комп’ютерне моделювання біосистем**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ другий (магістерський) \_\_\_\_\_  
галузь знань \_\_\_\_\_ 10 – Природничі науки \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
спеціальність \_\_\_\_\_ 105 Прикладна фізика та наноматеріали \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
освітня програма \_\_\_\_\_ Біофізика \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
вид дисципліни \_\_\_\_\_ за вибором \_\_\_\_\_  
(обов’язкова / за вибором)  
факультет \_\_\_\_\_ радіофізики, біомедичної електроніки та комп’ютерних систем \_\_\_\_\_

2022\_ / 2023\_ навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

22 липня 2022 року, протокол № 6.

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Горобченко Ольга Олександрівна, к.ф.-м.н., доцент кафедри молекулярної та медичної біофізики

Програму схвалено на засіданні кафедри молекулярної та медичної біофізики факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна.

Протокол від 19 липня 2022 року № 7

Завідувач кафедри молекулярної та медичної біофізики \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ Берест В. П.  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми: Біофізика  
назва освітньої програми

Гарант освітньо-професійної програми Біофізика \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ Берест В. П.  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено науково-методичною комісією факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем  
назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від 21 липня 2022 року, протокол № 6.

Голова науково-методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ Бутрим О. Ю.  
(підпис) (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Комп’ютерне моделювання біосистем” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки  
магістрів  
 (назва рівня вищої освіти)

спеціальності 105 Прикладна фізики та наноматеріали  
 спеціалізації \_\_\_\_\_

### 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни – вивчення математичних моделей та засобів комп’ютерного моделювання біологічних та хімічних систем.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є сформувати у здобувачів вищої освіти наступні загальні та фахові компетентності.

#### **Загальні:**

ЗК1. Здатність до абстрактного та системного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК3. Здатність використовувати інформаційні і комунікаційні технології.

ЗК5. Здатність приймати обґрунтовані рішення.

ЗК12. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

ЗК13. Здатність спілкуватися іноземною мовою.

ЗК15. Здатність зберігати та примножувати моральні, культурні, наукові цінності і досягнення суспільства на основі розуміння історії та закономірностей розвитку предметної області, їх місця у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій, використовувати різні види та форми рухової активності для активного відпочинку та ведення здорового способу життя.

ЗК17. Здатність до неординарного творчого мислення, креативність, здатність до системного мислення, здатність до науково-дослідної діяльності.

ЗК18. Здатність застосовувати теоретичні знання у практичних ситуаціях.

ЗК19. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК20. Здатність до ділової комунікації у професійній сфері, знання основ ділового спілкування, навички роботи в команді.

ЗК21. Здатність до прийняття рішень у складних і непередбачуваних умовах, що потребує застосування міждисциплінарних підходів та прогнозування.

#### **Фахові компетентності:**

ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної теоретичної та прикладної фізики.

ФК2. Уміння використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики при вивченні та дослідженні фізичних явищ і процесів.

ФК3. Уміння працювати із науковим обладнанням та вимірювальними приладами, обробляти та аналізувати результати досліджень.

ФК4. Уміння виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв’язування фізичних задач і моделювання фізичних систем.

ФК6. Уміння працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.

ФК8. Відповідальність в професійній діяльності, усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних досліджень.

ФК9. Уміння орієнтуватися на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики та інших природничих наук.

ФК10. Уміння здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту.

Основні завдання вивчення дисципліни також передбачають надання необхідного обсягу знань з теорії побудови математичних моделей біосистем та засобів їх комп'ютерного аналізу, що передбачає зокрема комп'ютерне розв'язання рівняння дифузії (лінійна крайова задача), комп'ютерне розв'язання рівняння дифузії-конвекції, комп'ютерне моделювання біосистем, що описуються системами двох рівнянь типу реакція-дифузія, моделювання нестійкості Тьюрінга та коливальної нестійкості на ПК з використанням математичних програмних пакетів.

1.3. Кількість кредитів – 5.

1.4. Загальна кількість годин – 150.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-й
Семестр	
2-й	-й
Лекції	
32 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
16 год.	год.
Лабораторні заняття	
год.	год.
Самостійна робота	
102 год.	год.
у тому числі індивідуальні завдання	
10 год.	

1.6. Заплановані результати навчання: студенти мають

знати теоретичний матеріал з курсу – розв'язання рівняння дифузії (лінійна крайова задача), теоретичні уявлення про відомі математичні моделі розподілених систем, визначення умов виникнення нестійкості Тьюрінга та умови виникнення коливальної нестійкості математичних моделей;

вміти проводити якісний аналіз розподілених моделей та за допомогою чисельних методів знаходити розв'язок систем нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних на ПК з використанням математичних програмних пакетів.

Програмні результати навчання, що забезпечуються дисципліною:

ПРН1. Здатність продемонструвати знання і розуміння наукових і математичних принципів, необхідних для розв'язування інженерних задач та виконання досліджень в галузі теоретичної та прикладної фізики, тощо.

ПРН2. Здатність продемонструвати знання сучасного стану справ, тенденції розвитку, найбільш важливі розробки та новітні технології в галузі теоретичної та прикладної фізики, наноматеріалів, тощо.

ПРН3. Здатність продемонструвати поглиблені знання у вибраній спеціалізації.

ПРН5. Вміти вибирати методи і моделювати явища та процеси в динамічних системах, а також аналізувати отримані результати.

ПРН8. Вміти застосовувати отримані знання й практичні навички, адаптувати результати наукових досліджень під час створення нового та експлуатації існуючого електроенергетичного, електротехнічного устаткування та його складових.

ПРН9. Вміти застосовувати знання і розуміння для розв'язування задач синтезу та аналізу елементів та систем, характерних обраній спеціалізації.

ПРН10. Вміти здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію з різних джерел. ПРН11. Вміти ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди.

ПРН15. Вміти застосовувати системний підхід, інтегруючи знання з інших дисциплін та враховуючи нетехнічні аспекти, під час розв'язання інженерних задач обраної спеціалізації та проведення досліджень.

ПРН20. Здатність усвідомлювати необхідність навчання впродовж усього життя з метою поглиблення набутих та здобуття нових фахових знань.

ПРН21. Здатність відповідально ставитись до виконуваної роботи та досягати поставленої мети з дотриманням вимог професійної етики.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

*Розділ 1. Моделі біологічних систем, що описуються одним та двома рівняннями типу «реакція-дифузія».*

*Тема 1. Розподілені біологічні системи.*

Розподілені системи, активні середовища, їх ознаки та стан. Синергетика, самоорганізація. Автохвилеві процеси та їх типи. Реакція Білоусова-Жаботинського. Приклади.

*Тема 2. Рівняння «реакція-дифузія».*

Моделі розподілених систем у загальному вигляді: системи нелінійних диференціальних рівнянь у часткових похідних, дифузія та взаємодія між компонентами системи, джерело та стік, протиборство дифузії та взаємодії. Рівняння дифузії у одномірному реакторі: одномірний реактор, закон Фіка для дифузійного потоку через перетин; рівняння просторово-часової еволюції  $C(r, t)$  у випадку дифузії. Отримання рівняння дифузії у диференціальній формі через розглядання випадкового блукання частинок (одномірний випадок). Отримання рівняння дифузії з конвекцією (одномірний випадок). Отримання рівняння дифузії у диференціальній формі через розглядання випадкового блукання частинок (двомірний випадок). Узагальнення рівняння для випадку тримірного (багатомірного) простору. Узагальнення рівняння для випадку багатьох речовин. Урахування наявності джерела та стоку речовини. Приклади з популяційної динаміки. Ефект Оллі. Приклади. Початкові та граничні (крайові) умови: типи граничних умов.

*Тема 3. Розв'язання одного рівняння типу реакція-дифузія.*

Розв'язання однорідного рівняння дифузії з нульовими початковими і нульовими граничними умовами 1 роду: метод розділення змінних, власні значення і власні функції задачі Штурма-Ліувілля, графічний вигляд окремих рішень для різних номерів гармонік, загальний розв'язок, врахування початкових умов, функція миттєвого джерела. Розв'язання однорідного рівняння дифузії з нульовими початковими і граничними умовами 2 роду. Розв'язання неоднорідного рівняння з нульовими початковими і нульовими граничними умовами. Розв'язання загальної крайової задачі (врахування початкових і граничних умов).

*Тема 4. Стійкість однорідних стаціонарних рішень системи двох рівнянь типу «реакція-дифузія». Нестійкість Тьюринга і дисипативні структури.*

Лінійний аналіз стійкості гомогенного стаціонарного стану системи двох рівнянь типу реакція-дифузія. Залежність дійсних частин коренів характеристичного рівняння (комплексних частот) від хвильового числа. Нестійкість Тьюринга і умови її виникнення, умови, що накладаються на параметри лінеаризованої системи. Структури Тьюринга (дисипативні структури). Число хвиль на відрізуку. **Приклад:** Лінійний аналіз стійкості гомогенного стаціонарного стану розподіленого «брюселятора». Дисипативні структури поблизу порогу нестійкості. Локалізовані дисипативні структури. Лінійний аналіз системи реакція-електродифузія. Типи просторово-часових режимів.

*Тема 5. Коливальна (хвильова) нестійкість та автоколивальні системи.*

Автоколивальні системи в лінійних і нелінійних системах. Граничний цикл. Біфуркація Андронова-Хопфа, м'яке збудження коливань. Коливальна нестійкість, структури Хопфа. Біжучі хвилі. Стоячі хвилі. Синфазні коливання. Аперіодичні коливання. **Приклад:** Параметрична діаграма брюсселятора. Біфуркаційна діаграма для розподіленої моделі брюсселятора. Умова взаємодії режимів Т'юринга і Хопфа. Аналіз моделі Ван дер Поля.

*Розділ 2. Комп'ютерне моделювання класичних біологічних та хімічних систем.*

*Тема 6. Модель «брюсселятора».*

Математична модель «брюсселятора». Комп'ютерне моделювання «брюсселятора». Аналіз результатів моделювання.

*Тема 7. Модель «орегонатора».*

Математична модель «орегонатора». Комп'ютерне моделювання «орегонатора». Аналіз результатів моделювання.

*Тема 8. Модель ФітцХью Нагумо.*

Математична модель ФітцХью Нагумо. Комп'ютерне моделювання системи ФітцХью Нагумо. Аналіз результатів моделювання.

*Тема 9. Модель Грея-Скота.*

Математична модель Грея-Скота. Комп'ютерне моделювання системи Грея-Скота. Аналіз результатів моделювання.

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<b>Розділ 1. Моделі біологічних систем, що описуються одним та двома рівняннями типу «реакція-дифузія».</b>												
Тема 1. Розподілені біологічні системи.	6	2				4						
Тема 2. Рівняння «реакція-дифузія»	34	8	2			24						
Тема 3. Розв'язання одного рівняння типу реакція-дифузії.	33	6	2			25						
Тема 4. Стійкість однорідних стаціонарних рішень системи двох рівнянь типу реакція-дифузія. Нестійкість Тьюринга і дисипативні структури.	11	2	1			8						

Тема 5. Коливальна (хвильова) нестійкість та автоколивальні системи.	9	2	1		6						
Контрольна робота 1	2		2								
Разом за розділом 1	95	20	8		67						
<b>Розділ 2. Комп'ютерне моделювання класичних біологічних та хімічних систем.</b>											
Тема 6. Модель «брюселятора».	15	4	2		9						
Тема 7. Модель «орегонатора».	16	4	1		11						
Тема 8. Модель ФітцХью Нагумо.	14	2	1		11						
Тема 9. Модель Грея-Скота.	8	2	2		4						
Контрольна робота 2	2		2								
Разом за розділом 2	55	12	8		35						
<b>Усього годин</b>	<b>150</b>	<b>32</b>	<b>16</b>		<b>102</b>						

#### 4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
<b>Розділ 1. Моделі біологічних систем, що описуються одним та двома рівняннями типу «реакція-дифузія».</b>		
1	Тема 2. Рівняння «реакція-дифузія». Розв'язування задач (визначення «реакції» за схемою, визначення початкових та граничних умов)	2
2	Тема 3. Розв'язання одного рівняння типу реакція-дифузії. Чисельне розв'язування рівняння реакція-дифузії в диференціальній формі. Чисельне розв'язування рівняння дифузії-конвекції в диференціальній формі.	2
3	Тема 4. Стійкість однорідних стаціонарних рішень системи двох рівнянь типу реакція-дифузія. Нестійкість Тьюринга і дисипативні структури. Розв'язування задачі з аналізу моделі.	1
4	Тема 5. Коливальна (хвильова) нестійкість та автоколивальні системи. Розв'язування задачі з аналізу моделі.	1
5	<b>Контрольна робота 1</b>	2
<b>Розділ 2. Комп'ютерне моделювання класичних біологічних та хімічних систем.</b>		
6	Тема 6. Модель «брюселятора». Комп'ютерне моделювання системи.	2
7	Тема 7. Модель «орегонатора». Комп'ютерне моделювання системи.	1
8	Тема 8. Модель ФітцХью Нагумо. Комп'ютерне моделювання системи.	1
9	Тема 9. Модель Грея-Скота. Комп'ютерне моделювання системи.	2
6	<b>Контрольна робота 2</b>	2
	Разом	16

#### 5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин

<b>Розділ 1. Моделі біологічних систем, що описуються одним та двома рівнянням типу «реакція-дифузія».</b>		
1	<i>Тема 1. Розподілені біологічні системи. Робота над теоретичними питаннями.</i>	4
2	<i>Тема 2. Рівняння «реакція-дифузія». Робота над теоретичними питаннями.</i>	24
3	<i>Тема 3. Розв'язання одного рівняння типу реакція-дифузії.. Робота над теоретичними питаннями. Чисельний аналіз моделей.</i>	25
4	<i>Тема 6. Стійкість однорідних стаціонарних рішень системи двох рівнянь типу реакція-дифузія. Нестійкість Тьюринга і дисипативні структури. Робота над теоретичними питаннями.</i>	8
5	<i>Тема 7. Коливальна (хвильова) нестійкість та автоколивальні системи. Робота над теоретичними питаннями.</i>	6
<b>Розділ 2. Комп'ютерне моделювання класичних біологічних та хімічних систем.</b>		
6	<i>Тема 6. Модель «брюселятора». Робота над теоретичними питаннями. Комп'ютерне моделювання системи.</i>	9
7	<i>Тема 7. Модель «орегонатора». Робота над теоретичними питаннями. Комп'ютерне моделювання системи.</i>	11
8	<i>Тема 8. Модель ФітцХью Нагумо. Робота над теоретичними питаннями. Комп'ютерне моделювання системи.</i>	11
9	<i>Тема 9. Модель Грея-Скота. Робота над теоретичними питаннями. Індивідуальне завдання.</i>	4
	<b>Разом</b>	<b>102</b>

### **6. Індивідуальні завдання.**

Розрахунково-графічна робота за темою 9: «Чисельний аналіз моделі». (10 б.).

### **7. Методи контролю**

Контрольні роботи. Розв'язування задач на практичних заняттях біля дошки, опитування, індивідуальне завдання, екзамен.

### **8. Схема нарахування балів**

Умовою допуску до екзамену є виконання **контрольних робіт**, оцінених на позитивну оцінку, а також отримання протягом семестру не менш ніж **30 балів** (з 60 балів).

Бали нараховуються за роботу на лекційних та практичних заняттях (1 бал за кожні 2 години заняття, загалом 24 бали).

Контрольна робота 1 містить чотири завдання, перше і третє з яких оцінюються у 3 бали, а друге і четверте у 4 бали у разі правильних та повних рішень задач. Контрольна робота 2 містить два завдання, кожне з яких оцінюється максимально у 6 балів. Частковий розв'язок задач знижують оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повного розв'язку містить робота студента.

Індивідуальне завдання захищаються студентами та оцінюється у 10 балів (10 балів – вичерпне та повний (відмінний) розв'язок та правильні і повні відповіді на додаткові питання; Частковий розв'язок задачі та неправильні або не повні відповіді на питання знижують оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повного розв'язку містить робота студента та наскільки вичерпними були відповіді на питання; 0 балів – розв'язок і відповіді неправильні або відсутні).

Екзаменаційний білет складається з трьох питань, за вичерпні відповіді на перші два з них нараховується по 13 балів, за вичерпну відповідь на третє питання – 14 балів (що дає максимальні 40 балів за іспит. Часткова відповідь на кожне питання та частковий розв'язок задачі знижує максимальну оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому,



яку частину від повної відповіді на це питання або розв'язку містить письмова робота студента.

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Екзамен	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Контрольна робота, передбачена навчальним планом		Індивідуальні завдання		
T1-T5	T6-T9	1	2	T3		
16	8	14	12	10	60	40

T1, T2 ... – теми розділів. Поточний контроль: 24 бали в рамках тем T1-T9 передбачено за роботу на відповідних лекційних і практичних заняттях, виконання завдань для самостійної роботи, відповіді на питання.

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	

## 9. Рекомендована література

### Основна література

1. Синергетика : підр. / І. О. Анісімов. К. : Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2014. 511 с.
2. Анісімов І. О. Синергетика. Навчальний посібник. Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 2006. 133 с.
3. Murrey J. D. Mathematical Biology. I. Introduction. 3 ed. Springer, 2002.
4. Murray J.D. Mathematical Biology. II: Spatial Models and Biomedical Applications. 3 ed. Springer, 2002.
5. Haken H. Synergetics An Introduction. 1983.

### Допоміжна література

1. Nikolis G., Prigogine I. Self-Organization in Nonequilibrium Systems. Wiley-Interscience Publication, Hoboken. 1977.
2. Glenn Marion. An Introduction to Mathematical Modelling. 2008.
3. Edward Gillman, Michael Gillman Modelling Nature: An Introduction to Mathematical Modelling of Natural Systems. CABI, 2019.
4. Література і синергетика : навч. посібник / Н. Абабіна. Одеса : Фенікс, 2021. 152 с.

## 10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Emerging Behavior and Spatiotemporal Chaos in Reaction-Diffusion Models: GPU-accelerated simulations in a web browser over the internet. WebGL Programs [http://www.thevirtualheart.org/webgl/DS\\_SIAM/SIAM\\_webgl\\_pattern\\_formation.html/](http://www.thevirtualheart.org/webgl/DS_SIAM/SIAM_webgl_pattern_formation.html/)
2. Dynamical Systems Web – Software, Media Gallery, Course materials and tutorials. <https://dsweb.siam.org/Education/TabId/794/PID/1957/evl/0/CategoryID/116/CategoryName/Course-Materials/Default.aspx>
3. ODE Online Calculator for 2x2 differential equation systems 1 order: <https://elsenaju.eu/Calculator/ODE-System-2x2.htm>

*Курси для дистанційного навчання*

1. Mathematical Modeling in Biology and Life Science  
<https://www.edx.org/course/mathematical-modeling-biology-life-pekingx-01139732x>
2. Modelling with Differential Equations  
<https://www.edx.org/course/modelling-with-differential-equations?index=product&queryID=a1ceba054dfa70065bee6c114c6af7c2&position=4>
3. Dynamical Modeling Methods for Systems Biology  
<https://www.coursera.org/learn/dynamical-modeling>
4. Introducing Cellular Automata  
<https://www.coursera.org/projects/cellular-automata>
5. Building an Ecosystem model with Insight Maker  
<https://www.coursera.org/projects/ecosystem-insight-maker>
6. Simulation and modeling of natural processes  
<https://www.coursera.org/learn/modeling-simulation-natural-processes#about>