

СЕКЦІЯ 3

ФУНДАМЕНТАЛЬНІ ТА ПРИКЛАДНІ ПРОБЛЕМИ ПРИРОДНИЧИХ НАУК

УДК [574.5:004.42] (07)

ПРИКЛАДНІ ПРОГРАМИ ДЛЯ ОБРОБКИ ГІДРОБІОЛОГІЧНИХ ДАНИХ

**Афанасьєв С. О., Юришинець В. І., Воліков Ю. М.,
Усов О. Є., Ляшенко А. В.**

Інститут гідробіології НАН України

E-mail: volikov4@ukr.net

Вибір методів і коефіцієнтів, що в них застосовуються, фахове використання алгоритмів їх розрахунку є одним із найважливіших кроків у процесі дослідження. Для спеціалістів і тих хто не має відповідної підготовки та потребує сучасного путівника для знайомства з ними, творчою групою співробітників Інституту гідробіології НАН України створені прикладні програми для обробки гідробіологічних даних.

Програма «BiotMetrics» розроблена з метою уніфікації і спрощення процедури розрахунку біотичних індексів та інших показників, які відображають якість води, знайомства з їх конструкціями і навчання алгоритмам обчислень. Для біоіндикації забруднення задіяні відомі метрики, що широко використовуються на річках і водоймах світу. Деяким з них запропоновані модифікації, адаптовані до особливостей фауністичного складу водних об'єктів різного типу в Україні.

«BiotMetrics» виконана в додатку «Excel», займає об'єм близько 25 Mb. Розрахунки проводяться на основі таксономічної структури, сформованої на базі визначників, які включають найбільш поширені групи прісноводної макрофауни безхребетних.

«BiotMetrics» складається з ряду функціонально пов'язаних «Аркушів» Excel. Для «прозорості» розрахунку на Аркушах Excel з назвами аббревіатури дев'яти біотичних індексів та їх

модифікацій, демонструється послідовність і результат їх обчислень. Позначеними шрифтами виділені задіяні на момент розрахунку індикаторні таксономічні групи і поточна їх кількість. Тут же знаходяться таблиці з активованими оціночними шкалами для кожного індексу. Шкали представлені в форматі авторської подачі і окремо, в адаптованому варіанті, відповідно до рекомендацій ВРД [1] про надання результатів оцінок за п'ятибальною системою. Аркуші Excel із запропонованими варіантами модифікацій біотичних індексів супроводжено позначками (m).

На Аркуші «Оціночні_шкали» запропоновані можливі варіанти шкал задіяних у програмі показників якості вод для різних типів водних об'єктів.

На окремих Аркушах Excel: «Домінанти», «Загальна_структура», «Діаграма_структури», «Сапробність», «Подібність», «Структурні_індекси», «Індекси_різноманітності», «Банк_даних» представлена відповідна назві інформація.

Програма «Saprogram - ZB» створена з метою уніфікації та спрощення процедури розрахунку значень показника сапробності по індикаторним організмам угруповань макрзообетоса і макрзоооперіфітона. Алгоритми обчислень складені з використанням логіко-евристичного (смыслового) підходу у відповідності до класичних методів: Пантле-Букк в модифікації Сладечека і ЗелінкаМарвана із вираженням індексу сапробності по Ротшайну в модифікації Годераша. Паралельно проводиться розрахунок модернізованого сапробіологічного індексу за методом Чертопруда.

У програмі задіяні списки таксонів-індикаторів із найбільш цитованих літературних джерел, розрахунок по кожному з яких проводиться окремо. Надається можливість роботи з різними їх комбінаціями (міксами).

Окремо, на Аркушах «Пантле-Букк», «Зелінка-Марван» та «Чертопруд», готові результати транслюються у вигляді значень трофо-сапробіологічних (еколого-санітарних) показників якості поверхневих вод, в форматі «Додатку 2» до методичного керівництва «Методика встановлення і використання екологічних нормативів якості поверхневих вод суші та естуаріїв України».

Програма «StatVo» створена з метою комплексного

використання коефіцієнтів схожості та оригінальності. Програма дозволяє розраховувати основні коефіцієнти схожості в формах розширення для якісного і кількісного порівняння угруповань. У програмі реалізований комплексний підхід до їх використання, захищений у вигляді патенту на корисну модель [2].

Результати обчислень представлені на Аркуші «Коеф_сходства» у вигляді вторинних матриць з розрахованими значеннями відповідних форм схожості. Значення індексів представлені у відсотках (результати обчислень за формулами помножені на 100). Для візуалізації отриманих даних, у разі перевищення значення індексу 50%-го рівня схожості, відповідна клітинка автоматично виділяється сірим кольором, більше 75% - чорним. Додатково розраховуються основні індекси біологічного і видового різноманіття, а також окремі сапробіологічні показники.

У програмах «**Saprogram - ZB**» та «**StatVo**» в якості вхідних даних використовуються робочі списки видів гідробіонтів з відповідними кількісними показниками у вигляді таблиць Excel.

Кожна з програм, що пропонуються супроводжена інструкцією для користування, списком використаних літературних джерел і захищена свідоцтвом на авторство [3, 4, 5].

Детальні настанови по роботі з програмами представлено у Методичному посібнику: Афанасьєв С.О., Юришинець В.І., Воліков Ю.М., Усов О.Є., Ляшенко А.В. Прикладні програми для обробки гідробіологічних даних. Методичний посібник. – Київ, 2019. – 28 с. При використанні програм обов'язковою умовою є посилання на цей методичний посібник!

Безкоштовно отримати останні версії програмних продуктів можна надіславши заповнену форму заявки на електронну адресу Інституту гідробіології НАН України: volikov4@ukr.net, в темі листа зазначивши: «заявка для отримання програмних продуктів».

Форма заявки розміщена на відповідній сторінці сайту інституту: <http://hydrobio.kiev.ua/ua/posluhy/prykladni-prohramy>.

Автори будуть вдячні за конструктивні пропозиції з приводу удосконалення та впровадження програмних продуктів. Електронна адреса для спілкування: volikov4@ukr.net.

Список літератури

1. Водна Рамкова Директива ЄС 2000/60/ЄС. Основні терміни та їх визначення / EU Water Framework Directive 2000/60/EC. Definitions of Main Terms. – К., - 2006. – 240 с.
2. Патент України на корисну модель UA 128459 U, G01N 33/18/ Спосіб комплексного використання коефіцієнтів схожості для визначення екологічного стану водних об'єктів / Ю.М. Воліков. – № u201711404; заявл. 21.11.2017; опубл. 25.09.2018. – Бюл. № 18/2018.
3. А.с. Україна № 82747. Воліков Ю.М., Ляшенко А.В. BiotMetrics; опубл.в Бюл. – № 51. – 2019.
4. А.с. Україна № 76309. Saprogram - ZB / Воліков Ю.М., Усов О.Є.; заяв. 07.11.2017; опубл. 27.04.2018, Бюл. № 48.
5. А.с. Україна № 59402. StatVo / Воліков Ю.М.; заявл. 25.02.2015; опубл. 30.07.2015, Бюл. № 37.

UDC 547.53: 615.28

SYNTHESIS OF NEW BIOACTIVE COMPOUNDS BASED ON ANIONARYLATION PRODUCTS

**Baranovskyi V. S., Symchak R. V., Tulaidan H. M.,
Yatsiuk V. M., Petrushka B. M., Grishchuk B. D.**

Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University
E-mail: baranovsky@tnpu.edu.ua

The anionarylation reaction is widely used in organic synthesis for chemo- and regioselective functionalization of multiple bonds of unsaturated compounds. The multicomponent and one-step nature of this reaction make it possible for obtaining a new hard-to-reach arylalkyl derivatives containing various pharmacophore fragments with sufficiently high yields under mild conditions.

We have significantly expanded the range of arylating reagents, neutral and anionic nucleophiles, studied the basic patterns of reactions of catalytic and noncatalytic anionarylation of different types of unsaturated compounds (vinyl and allyl derivatives, conjugated alkadienes, functionalized acrylates, biunsaturated compounds with isolated multiple bonds).

The results of researches allowed to propose the preparative