

# Obecné poznámky k pracovním biochemickým výpočtům

**Pozn.:** tento text se týká výpočtů, jak je provádíme v biochemické laboratoři, chceme-li např. průběžně sledovat průběh izolace, enzymové reakce apod. Mohli bychom také hovořit o „výpočetních odhadech“ a zadání takových příkladů by mohla začínat frází „odhadněte výpočtem“. Jinak samozřejmě není na výpočtech v biochemii nic zvláštního a speciálního, platí pro ně totéž, co pro výpočty v ostatních chemických oborech, ve fyzice atd.

Pracovní výpočty v biochemii mají několik zvláštností a úskalí, která si postupně probereme:

- omezená přesnost (často inherentně, tj. neodstranitelně),
- málokdy jsou k dispozici přímo vzorce pro výpočet (jde o různé „řetězové operace“),
- numericky nepříjemný rozsah řádů (malé navážky, objemy, velké molekuly).“

## 1. Přesnost

Biochemický materiál - ať už jde o výchozí materiál pro izolace (svalová tkáň, semena atd.) nebo získané/izolované bio(makro)molekuly, je často proměnlivý a nejednotný - např. může mít různý obsah vody/sušiny, molekuly, které chceme izolovat, se mohou lišit různými modifikacemi nebo částečnou degradací, jejich biologická aktivita může být proměnlivá v čase apod.

Proto je v biochemii jen zřídkakdy dosažitelná „analytická přesnost“, resp. takové přesnosti lze dosáhnout jen za zvláštních okolností a aplikací speciálních postupů.

V běžné práci to obvykle možné není.

Přesnost našich výsledků můžeme vyjadřovat různým způsobem (podrobně to popisuje a řeší tzv. *teorie chyb*), ale v praxi často vystačíme se zjednodušeným vyjádřením, tzv. **počtem platných číslic**. Toto číslo vyjadřuje, kolik míst (číslic) ve výsledku měření je spolehlivých s ohledem na možnosti měřicí metody.

(Příklad: opakovaným přikládáním dřevěného měřítka o délce jeden metr jsme změřili vzdálenost od radnice ke kostelu jako 65 m - výsledek má DVĚ platná místa. Podobným měřítkem, ale s dělením po 1 cm jsme získali hodnotu 65,35 m - výsledek má ČTYŘI platná místa. Pokud takové měření opakujeme např. desetkrát a průměrná hodnota bude 65,347 m se střední kvadratickou chybou průměru 0,007 m, je přesnost výsledku také na čtyři platná místa. Tento počet platných míst se nezmění, ani když výsledek převedeme na centimetry, tedy 6500 cm v prvním a 6535 cm ve druhé případě. Právě tak, změříme-li naším měřítkem velikost kanálové mřížky jako 0,32 m, bude počet platných míst jen DVĚ - 32 cm.)

Platí přitom zásada, že celková přesnost výsledku (získaného např. výpočtem s pomocí několika měřených veličin) je v nejlepší případě rovna přesnosti **NEJHORŠÍHO** z měřených vstupních dat. Takže i když např. vážíme na analytických vahách s přesností na pět platných číslic, odměřování objemu děleno pipetou s přesností na tři místa způsobí, že vypočtená koncentrace je v nejlepší případě přesná na tři místa.

S ohledem na výše řečené platí, že většinou v pracovních biochemických výpočtech pracujeme s přesností dvě až tři platná místa. Díky tomu např. obvykle můžeme zanedbávat změny celkového objemu kapalin při mísení, rozdíly v hustotě roztoků (většinou jde o vodné roztoky a jejich hustotu bereme rovnu jedné) nebo vliv malých změn teploty na koncentraci atd.

## 2. Komplexnost

Práce v biochemické laboratoři je často organizována tak, že se nejprve připravují koncentrovanější zásobní roztoky, jejich ředěním pak pracovní roztoky a teprve ty se pak pipetují do reakční směsi.

(Důvodem je také to, že jinak by bylo nutné např. pipetovat velmi malé objemy řádu jednotek mikrolitrů. To je operace velmi málo přesná - s chybou kolem 5-10%, tedy max. na dvě platná místa, a pokud to jde, snažíme se postupovat jinak.)

Proto je často výhodné postupovat při řešení výpočtu „krok za krokem“, rovnou si vyčíslovat mezivýsledky - jednak je můžeme později potřebovat znovu (např. koncentraci zásobního roztoku) a jednak tím máme snazší kontrolu nad postupem práce.

Tento postup si později ukážeme na konkrétních příkladech.

### 3. Numerická stránka výpočtů

Zdánlivě nejde ve věku kalkulaček o žádný problém. Přesto je při práci s (velmi) velkými a malými čísly poměrně snadné udělat chybu v zadání čísla. Také proto doporučuji používat tzv. vědecký zápis čísel. Libovolné číslo  $N$  v něm je možno vyjádřit pomocí výrazu

$$N = M \cdot 10^m$$

kde  $M$  označujeme jak mantisu a  $m$  jako charakteristiku. (Podle analogie s logaritmickým vyjádřením). Přitom se zpravidla hodnota  $M$  volí tak, aby byla mezi 1 a 10.

Místo 128; 0,00035 a 4 500 000 pak píšeme  $1,28 \times 10^2$ ;  $3,5 \times 10^{-5}$ ; a  $4,5 \times 10^6$ , což usnadňuje výpočty. Násobíme-li taková čísla (nebo dělíme), násobíme (dělíme) jen mantisy, charakteristiky se sčítají nebo odčítají.

Pozn.: srovnajte situaci s (dekadickými) logaritmy čísel (budu pro ně používat označení  $\log N$ )

např.  $\log 128 = 2,08991$ ,  $\log 1,28 = 0,08991$ ,  $\log 0,128 = (0,08991 - 1,00000) = -0,91009$

$\log (128 \times 1,28 \times 0,128) = \log 128 + \log 1,28 + \log 0,128$

Používání mantis a charakteristik pochází právě z využití logaritmů pro výpočty - v době, kdy nebyly kalkulačky, bylo mnohem snazší realizovat sčítání než násobení, sčítat „na papíře“ lze vcelku snadno libovolné množství čísel, kdežto násobit (dělit) jen dvě.

Získáte-li v této metodě zručnost (a to by nemělo trvat dlouho), velmi vám pomůže při vyčíslování i složitých výpočtů. Jako „bonus“ získáte i přímé povědomí o „počtu platných číslic“ svého výsledku (je to počet nenulových číslic v mantise).

Vedle této „vědecké notace“ se používá (zejména v technických oborech, vč. technické chemie a chemické technologie) také tzv. „inženýrská notace“ - ta je v zásadě stejná, pouze hodnoty charakteristik jsou omezeny na celočíselné násobky tří (tedy. ..., +6, +3, 0, -3, -6, ...), což odpovídá doporučeným dekadickým násobkům jednotek SI (resp. příslušným předponám: ..., mega, kilo, mili, mikro, ...).

Výhodou inženýrské notace je, že díky omezení možných hodnot charakteristik je snazší jednotlivá čísla sčítat či odčítat (k tomu je totiž potřebné nejprve je převést na stejnou hodnotu charakteristiky, a v inženýrské notaci už je to často uděláno), Jak známo, nelze sčítat (přímo) metry a milimetry