Теория Ганстоуна (Gunstone)

Это 1,3 статистическое, 2 статистическое распределение.

Описывает типовой и видовой составы исключительно растительных триглицеридов.

Позиционная специфичность распределения триглицеридов растений:

преимущественное содержание кислот I категории в 1,3-, а кислот II категории - в 2-положениях $^{[1]}$

- I категория большинство насыщенных кислот, ненасыщенные кислоты с \$m > 18\$
- II категория ненасыщенные кислоты с \$m \leq 18\$

Теория Ганстоуна базируется на умозрительной гипотезе Савари и Денюэлля о двух позиционно-специфичных ферментах биосинтеза, согласно которой вначале в 2-положении статистически распределяются \$A_{II}\$, а затем 1,3-положения статистически замещаются смесью \$A_I\$ и остатка кислот \$A_{II}\$ (если он есть).

Типовой состав по теории Ганстоуна

```
\begin{cases}
 [S_3]_{TC/G} \&=\& \left( \frac{1}{2} \right)
    0\% < [S] < 66\%: & 0\\
    66\% < [S] < 100\%: & 3[S] - 2 \equiv -3[U] + 1
 \end{cases}\\
 [S 2U] {TC/G} &=& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: 8 (\frac32[S])^2 \equiv \frac32([S] - [S][U]) \equiv (\frac32
- \frac32[U])^2\\
    66\% < [S] < 100\%: & -3[S] + 3 \equiv 3[U]
 \end{cases}\\
 [SU_2]_{TC/G} \&=\& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: \& -\frac92[S]^2 + 3[S] \equiv \frac32[S](3[U] - 1) \equiv
-\frac92[U]^2 + 6[U] - \frac32\\
    66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}\\
 [U_3]_{TC/G} &= begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: & (1 - \frac{32[S]}^2 \wedge (\frac{51}{2})^2 \cdot \frac{32[U]}{2} - \frac{12}{2}
    66\% < [S] < 100\%: & 0
  \end{cases}
\end{cases}
```

```
\begin{split}
 8[S] = 1 - [U] \setminus
 \& p = \frac{32[S] = \frac{32[U]}{}}
 \& q = 1 - p = 1 - \frac{32[S]}{\pi ac32[U]} - \frac{12}{\pi}
 & \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%:
                       & \begin{cases}
     f([U_3]) \neq f([U'_2]) = q^2
     f([SU_2]) \neq f([S'U']) = 2pq
     f([S 2U]) \neq f([S' 2]) = p^2
   \end{cases}\\
   66\% < [S] < 100\%: & \begin{cases}
     f([S 2U]) \neq f([U']) = -3[S] + 3 \neq 3[U]
     f([S_3]) \neq f([S']) = 3[S] - 2 \neq 0 + 1
   \end{cases}
 \end{cases}
\end{split}
```

Видовой состав по теории Ганстоуна

```
\begin{cases}
 [^1S^2S^3S]_{SC/G} &=& 6 \frac{[^1S][^2S][^3S]}{[S]^3} [S_3]_{TC/G} &=&
\begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & 6 \frac{[^1S][^2S][^3S]}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 [^1S^2S_2]_{SC/G} &=& 3 \frac{[^1S][^2S]^2}{[S]^3} [S_3]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & 3 \frac{[^1S][^2S]^2}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 [^1S 3] {SC/G}
               &=& \frac{[^1S]^3}{[S]^3} [S_3]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: 8 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & \frac{[^1S]^3}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 [^1S^1U^2S]_{SC/G} &=& 2 \frac{[^1S][^1U][^2S]}{[S]^2[U]} [S_2U]_{TC/G} &=&
\begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & \frac92 \frac{[^1S][^1U][^2S]}{[U]}\\
   66\% < [S] < 100\%: & 6 \frac{[^1S][^1U][^2S]}{[S]^2}
 \end{cases}\\
 [^1S^1U^1S]_{SC/G} &=& \frac{[^1S]^2[^1U]}{[S]^2[U]} [S_2U]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   66\% < [S] < 100\%: & 3 \frac{[^1S]^2[^1U]}{[S]^2}
 \end{cases}\\
 [^1S^1U^2U]_{SC/G} &=& 4 \frac{[^1U][^2U][^3U]}{[U]^3} [SU_2]_{TC/G} &=&
\begin{cases}
   66\% < [S] < 100\%: & 0
```

```
\end{cases}\\
      [^1S^1U^1U]_{SC/G} &=& 2 \frac{[^1U][^2U]^2}{[U]^2} [SU_2]_{TC/G} &=& \begin{cases}
             66\% < [S] < 100\%: & 0
      \end{cases}\\
      [^1U^2U^3U]_{SC/G} &=& 6 \frac{[^1U][^2U][^3U]}{[U]^3} [U_3]_{TC/G} &=&
\begin{cases}
             66\% < [S] < 100\%: & 0
      \end{cases}\\
      [^1U^2U 2] \{SC/G\} = 8 = 8 \ frac\{[^1U][^2U]^2\}\{[U]^3\} = 0 \ frac\{[^1U][^2U]^2\} = 0 \ 
             66\% < [S] < 100\%: & 0
      \end{cases}\\
      [^1U_3]_{SC/G} &=& \frac{[^1U]^3}{[U]^3} [U_3]_{TC/G} &=& \begin{cases}
             0\% < [S] < 66\%: 8 \frac{[^1U]^3}{[U]^3} (\frac32[U] - \frac12)^2\\
             66\% < [S] < 100\%: & 0
      \end{cases}
\end{cases}
```

▼ *Details*

```
\begin{split}\\

& P_{[^1A^2A^3A]} = [^1A^2A^3A], [^1A^3A^2A], [^2A^1A^3A], [^2A^3A^1A],

[^3A^1A^2A], [^3A^2A^1A] (\times6)\\

& P_{[^1A^2A^2A]} = [^1A^2A^2A], [^2A^1A^2A], [^2A^2A^1A] (\times3)\\

& P_{[^1A^1A^1A]} = [^1A^1A^1A] (\times1)\\

& P_{[^1S^1U^2S]} = [^1S^1U^2S], [^2S^1U^1S] (\times2)\\

& P_{[^1S^1U^1S]} = [^1S^1U^1S] (\times1)\\

& P_{[^1S^1U^2U]} = [^1S^1U^2U], [^1S^2U^1U], [^1U^2U^1S], [^2U^1U^1S] (\times4)\\

& P_{[^1S^1U^1U]} = [^1S^1U^1U], [^1U^1U^1S] (\times2)\\

& n \frac{[^1S]}{[S]}\frac{[^2S]}{[S]}\frac{[^3S]}{[S]} (3[S] - 2)\\
\end{split}
```

Вычисление ПТС исключается, поскольку при S[S] < 66% $S[S_2U]_G = [SUS]$, a $S[SU_2]_G = [SUU]$.

Воспользуемся результатами расчета ТС по теории Ганстоуна, абстрагировавшись от изначальной гипотезы и предположив, что виды внутри типа распределяются прямо пропорционально факторам селективности ^[4] их составляющих. В результате получим значения ПВС и СВС, близкие к рассчитанным по Вандер Валю.

Позиционно-видовой состав по модифицированной теории Ганстоуна

```
\begin{flalign}
```

```
& [^1S^2S^3S] {PSC/G} &&=&& 6 \frac{[^1S]SF {S 1}[^2S]SF {S 2}[^3S]SF {S 3}}{[S]^3}
[S_3]_{TC/G} \&\&=\&\& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%:
                      //0 B
   66\% < [S] < 100\%: & 6 \frac{[^1S]SF_{S_1}[^2S]SF_{S_2}[^3S]SF_{S_3}}{[S]^3}
(3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 & [^1S^1S^2S]_{PSC/G} &&=&& 2 \frac{([^1S]SF_{S_1})^2[^2S]SF_{S_2}}{[S]^3}
[S_3]_{TC/G} \&\&=\&\& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & 2 \frac{([^1S]SF_{S_1})^2[^2S]SF_{S_2}}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 & [^1S^2S^1S] {PSC/G} &&=&& \frac{([^1S]SF {S 1})^2[^2S]SF {S 2}}{[S]^3}
[S_3]_{TC/G} \&\&=\&\& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: 8 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & \frac{([^1S]SF {S 1})^2[^2S]SF {S 2}}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}\\
 & [^1S^1S^1S]_{PSC/G} &&=&& \frac{([^1S]SF_{S_1})^3}{[S]^3} [S_3]_{TC/G} &&=&&
\begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & \frac{([^1S]SF_{S_1})^3}{[S]^3} (3[S] - 2)
 \end{cases}
\end{flalign}
```

```
\begin{flalign}
 & [^1S^2S^1U]_{PSC/G} &&=&& 2
\frac{[^1S]SF_{S_1}[^1U]SF_{U_1}[^2S]SF_{S_2}}{[S]^2[U]} [S_2U]_{TC/G} &&=&&
\begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: & \frac92
\frac{[^1S]SF {S 1}[^1U]SF {U 1}[^2S]SF {S 2}}{[U]}\\
    66\% < [S] < 100\%: & 6 \frac{[^1S]SF_{S_1}[^1U]SF_{U_1}[^2S]SF_{S_2}}{[S]^2}
 \end{cases}\\
 & [^1S^1U^2S] {PSC/G} &&=&& \frac{[^1S]SF {S 1}[^1U]SF {U 1}[^2S]SF {S 2}}{[S]^2[U]}
[S_2U]_{TC/G} &= 88 \cdot [S_2U]_{cases}
    0\% < [S] < 66\%: 8 \frac92
\frac{[^1S]SF {S 1}[^1U]SF {U 1}[^2S]SF {S 2}}{[U]}\\
    66\% < [S] < 100\%: & 6 \frac{[^1S]SF_{S_1}[^1U]SF_{U_1}[^2S]SF_{S_2}}{[S]^2}
 \end{cases}\\
 & [^1S^1U^1S] {PSC/G} &&=&& \frac{[^1S]SF {S 1}^2[^1U]SF {U 1}}{[S]^2[U]}
[S_2U]_{TC/G} \&\&=\&\& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: & \frac94 \frac{[^1S]SF_{S_1}^2[^1U]SF_{U_1}}{[U]}\\
    66\% < [S] < 100\%: & 3 \frac{[^1S]SF {S 1}^2[^1U]SF {U 1}}{[S]^2}
 \end{cases}
\end{flalign}
```

```
(3[U] - 1)\\
    66\% < [S] < 100\%: & 0
\end{cases}\\
    & [^1S^1U^1U]_{PSC/G} &&=&& 2 \frac{[^1U]SF_{U_1}[^2U]SF_{U_2}^2}{[U]^2}
[SU_2]_{TC/G} &&=&& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: & 3 \frac{[^1U]SF_{U_1}[^2U]SF_{U_2}^2}{[U]^2} (3[U] - 1)\\
    66\% < [S] < 100\%: & 0
\end{cases}
\end{flalign}
```

```
\begin{flalign}
 & [^1U^2U^3U] {PSC/G} &&=&& 6 \frac{[^1U]SF {U 1}[^2U]SF {U 2}[^3U]SF {U 3}}{[U]^3}
[U_3]_{TC/G} \&\&=\&\& \ensuremath{\ }
   (\frac32[U] - \frac12)^2\\
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}\\
 & [^1U^2U_2]_{PSC/G} &&=&& 3 \frac{[^1U]SF_{U_1}[^2U]SF_{U_2}^2}{[U]^3}
[U_3]_{TC/G} \&\&=\&\& \ensuremath{\ begin{cases}\ }
   0\% < [S] < 66\%: 8 3 \frac{[^1U]SF_{U_1}[^2U]SF_{U_2}^2}{[U]^3} (\frac{1}{C}U) - \frac{1}{C}U
\frac12)^2\\
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}\\
 & [^1U_3]_{PSC/G} &&=&& \frac{[^1U]SF_{U_1}^3}{[U]^3} [U_3]_{TC/G} &&=&&
\begin{cases}
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}
\end{flalign}
```

TODO

```
\begin{cases}
 [S_3]_{TC/G} \&=\& \left( \frac{1}{2} \right)
    0\% < [S] < 66\%: 8 0\\
    66\% < [S] < 100\%: & 3[S] - 2 \equiv 1 - 3[U]
 \end{cases}\\
 [S_2U]_{TC/G} \&=\& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: & (\frac32[S])^2 \equiv (\frac32 - \frac32[U])^2\\
    66\% < [S] < 100\%: & 3 - 3[S] \equiv 3[U]
 \end{cases}\\
 [SU_2]_{TC/G} &=& \begin{cases}
    0\% < [S] < 66\%: 8 -\frac92[S]^2 + 3[S] \equiv \frac32[S](3[U] - 1) \equiv
-\frac92[U]^2 + 6[U] - \frac32\\
    66\% < [S] < 100\%: & 0
  \end{cases}\\
 [U_3]_{TC/G} \&=\& \left( \frac{1}{2} \right)
    0\% < [S] < 66\%: & (1 - \frac32[S])^2 \equiv (\frac32[U] - \frac12)^2\\
    66\% < [S] < 100\%: & 0
```

```
\end{cases}
\end{cases}
```

Позиционно-типовой состав по теории Ганстоуна

```
\begin{cases}
 [SSS]_{PTC/G} \&=\& [S_3]_{TC/G} \&=\& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: 8 0\\
   66\% < [S] < 100\%: & 3[S] - 2
 \end{cases}\\
 [SSU]_{PTC/G} &=& \frac23[S_2U]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & (\frac23[S])^2\\
   66\% < [S] < 100\%: & 2[U]
 \end{cases}\\
 [SUS]_{PTC/G} &=& \frac13[S_2U]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & (\frac16[S])^2\\
   66\% < [S] < 100\%: & [U]
 \end{cases}\\
 [SUU]_{PTC/G} &=& \frac23[SU_2]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & [S](3[U] - 1)\\
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}\\
 [USU]_{PTC/G} &=& \frac13[SU_2]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: & \frac12[S](3[U] - 1)\\
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}\\
 [UUU]_{PTC/G} &=& [U_3]_{TC/G} &=& \begin{cases}
   0\% < [S] < 66\%: 8 (\frac32[U] - \frac12)^2\\
   66\% < [S] < 100\%: & 0
 \end{cases}
\end{cases}
```

Стерео-типовой состав по теории Ганстоуна

```
\begin{cases}

[SSS]_{STC/G} &=& [SSS]_{PTC/G} &=& [S_3]_{TC/G}\\

[SSU]_{STC/G} &=& \frac12[SSU]_{PTC/G} &=& \frac13[S_2U]_{TC/G}\\

[USS]_{STC/G} &=& \frac12[SSU]_{PTC/G} &=& \frac13[S_2U]_{TC/G}\\

[SUS]_{STC/G} &=& [SUS]_{PTC/G} &=& \frac13[S_2U]_{TC/G}\\

[SUU]_{STC/G} &=& \frac12[SUU]_{PTC/G} &=& \frac13[SU_2]_{TC/G}\\

[UUS]_{STC/G} &=& \frac12[SUU]_{PTC/G} &=& \frac13[SU_2]_{TC/G}\\

[USU]_{STC/G} &=& [USU]_{PTC/G} &=& \frac13[SU_2]_{TC/G}\\

[USU]_{STC/G} &=& [USU]_{PTC/G} &=& \frac13[SU_2]_{TC/G}\\

[UUU]_{STC/G} &=& [UUU]_{PTC/G} &=& [U_3]_{TC/G}\\

\end{cases}
```

```
SU_2_G \eq \begin{cases}
0\% < [S] < 66\% & 3 / 2 * [S] * (3 * [U] - 1)\\
```

```
66\% < [S] < 100\% & 0
\end{cases}
```

```
\begin{cases}
    0\% < [S] < 66\% & 1 - ([SU_2] + [S_2U]) = 1 - 3 * ([S]^2 * [U] + [S] * [U]^2) = ((3 * [U] - 1) / 20)^2\\
    66\% < [S] < 100\% & 0
\end{cases}$
```

После 66% остался \$S_2U\$ \$⇒\$ остался \$[SSU]\$, \$[USS]\$ или \$[SUS]\$.

- для типового состава (соответствует разложению бинома):
- \$[S_2U] = [SSU] + [USS] + [SUS] = 3 * [S]^2 * [U]\$
- \$[SU_2] = [SUU] + [UUS] + [USU] = 3 * [S] * [U]^2\$
- остальные значения не отличаются от значений стерео-типового и позиционно-типового составов:
- $S[S_3] = [S]^3$
- $[U_3] = [U]^3$

Calculation

 $3[A] = 2[A]_{13} + [A]_{2}^{[5]}$

- [1] Верещагин А. Г. Биохимия триглицеридов. 1972, с. 171.
- [2] Верещагин А. Г. Биохимия триглицеридов. 1972, с. 172.
- [3] Верещагин А. Г. Биохимия триглицеридов. 1972, с. 174.
- [4] Gunstone F. D. et al. Glyceride studies. V. The distribution of unsaturated acyl groups in vegetable triglycerides //Journal of the American Oil Chemists' Society. -1965. -1.42. -10.25. -1.42. -10.25. -1.42. -10.25. -1.42. -10.25. -
- [5] Верещагин А. Г. Биохимия триглицеридов. 1972, с. 116.