

СИСТЕМА ХРАНЕНИЯ И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ ФЛУКТУАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Асташкин

ВВЕДЕНИЕ

Для исследования вещества на одномолекулярном уровне без нарушения термодинамического равновесия наиболее подходящими являются флуоресцентные методы исследования. Среди них особый интерес вызывают методы флуоресцентной флуктуационной спектроскопии (ФФС) [1], позволяющие определить качественный и количественный состав веществ без разрушения их состава и структуры.

На данный момент времени существует несколько методов анализа данных ФФС. Для реализации каждого из них на компьютере требуется хранить множество параметров измерения, потоков фотоотсчетов и вычисленных характеристик, таких как интенсивность, корреляционная функция, гистограммы числа фотоотсчетов. Возникает задача в структурированном хранении большого количества разнородных данных и предоставлении к ним удаленного доступа.

Целью работы является создание базы данных для хранения результатов флуоресцентных флуктуационных экспериментов, а также создание удаленного интерфейса доступа к данным.

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ ФЛУКТУАЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

В эксперименте регистрируются флуктуации флуоресценции в конфокальном объеме. Анализ этих флуктуаций позволяет определить число флуоресцирующих частиц и их подвижность (коэффициент диффузии), т.е. охарактеризовать распределение частиц по размерам [1].

Основу установки составляет микроскоп. В качестве источника излучения используется лазер. Для освещения образца и регистрации флуоресценции применяется конфокальный объектив с большой числовой апертурой. В качестве детектора с низким уровнем шума и высокой чувствительностью используется лавинный фотодиод.

Среди методов ФФС наиболее известными являются: метод флуоресцентной корреляционной спектроскопии, метод анализа распределения интенсивности флуоресценции и куммулянтный метод анализа распределения фотоотсчетов. Все они основаны на построении теоретической зависимости, наиболее точно соответствующей экспериментальной кривой, а далее решается обратная задача математики, нахождения неизвестных параметров по известным зависимостям. Так, например, метод флуоресцентной корреляционной спектроскопии позволяет получить ко-

эffiциент диффузии и концентрацию молекул [2]. Для разрешения смеси веществ с близкими значениями диффузионных времен, но отличающихся по яркости, были предложены метод анализа амплитудных флуктуаций интенсивности флуоресценции [3] и анализ кумулянтного распределения числа фотоотсчетов [4]. С помощью этих методов можно получить молекулярную яркость, а также среднее количество молекул в наблюдаемом объеме.

ТЕХНОЛОГИИ БАЗ ДАННЫХ И WEB-ТЕХНОЛОГИИ

Для хранения большого количества данных наилучшим способом является технология использования баз данных (БД). БД представляет собой совокупность взаимосвязанных данных при такой их минимальной избыточности, которая допускает их использование оптимальным образом для одного или нескольких приложений в определенной предметной области человеческой деятельности.

Для использования всех возможностей БД в современных программах используется система управления базами данных (СУБД). Она имеет трехуровневую архитектуру. Нижний уровень определяется физической моделью данных, которая описывает размещение данных на физических носителях. Средний уровень – концептуальной моделью данных, которая описывает логическую структуру данных без указания деталей их физического хранения. Третий уровень – внешний, или уровень представлений (интерфейс), выводит необходимые данные в требуемом формате, скрывая остальную часть БД [5].

Одним из способов удаленного доступа к данным является создание web-приложений. В основе такого приложения лежит клиент-серверная архитектура. Клиент – компьютер (программа), осуществляющий запрос к серверу на выполнение каких-либо действий или на предоставление какой-либо информации. Сервер – компьютер (программа), которая принимает запросы клиента, обрабатывает их и отправляет обратно. В качестве клиента, в частности, используется интернет-браузер, а роль сервера выполняет web-сервер. Одним из способов расширения функциональности клиента является применение java-апплетов под управлением интернет-браузера, а прием, обработку и отправку данных на сервере могут выполнять java-сервлеты [6].

СИСТЕМА ОБРАБОТКИ И ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ ФЛУКТУАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Система обработки и хранения данных построена по клиент-серверной архитектуре, так как это позволяет получить удаленный доступ к данным, не заботясь об их местонахождении.

Для реализации всех частей программного комплекса использовались технологии J2EE (Java 2 Enterprise Edition), как кросс-платформенные и

наиболее универсальные. Клиентская часть реализована при помощи использования технологий java-апплетов, так как они позволяют создавать очень мощный пользовательский интерфейс, а так же производить первоначальную обработку данных на стороне клиента, в связи с большими размерами исходных файлов.

Серверная часть приложения была реализована при помощи использования технологий java-сервлеты. Одновременно она является клиентом для БД, в роли которой была использована СУБД MySQL. Эта БД была выбрана ввиду своего относительно небольшого размера, мощной поддержки индексов, механизма внешних ключей, а так же поддержки многопользовательского доступа и достаточно хорошей защищенности данных от несанкционированного доступа. При всех этих достоинствах она еще и является абсолютно бесплатной.

БД хранит следующие данные: исследователей, объекты исследования, цели исследования, результаты конкретного эксперимента, дату и время эксперимента, совокупность характеристик и параметров, необходимых для проведения анализа данных, настройки прибора. Для решения этих задач была спроектирована БД, схема данных которой представлена на рис. 1.

Таким образом, созданное приложение позволяет решать следующие задачи: хранить и выдавать информацию об исследователе, информацию об анализируемом веществе, хранить потоки фотонов и их параметры, выдавать дату и время исследования, выдавать совокупность характеристик и их параметров, информацию о применяемых приборах, разделять эксперименты по группам, загружать файлы характеристик и выдавать их графическое изображение.

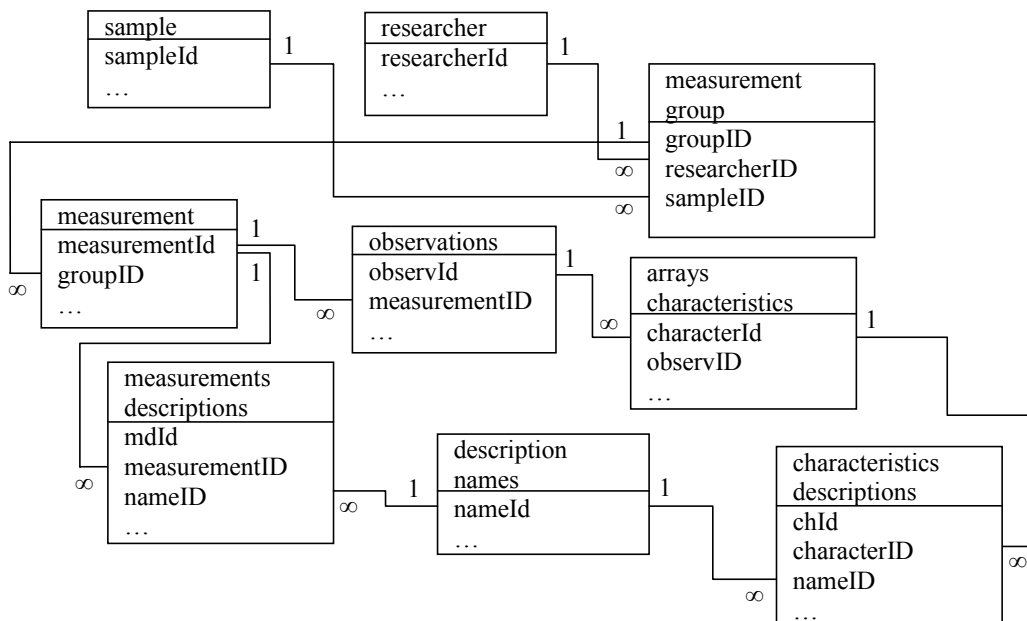


Рис. 1. Схема данных

Приложение поддерживает многопользовательскую архитектуру удаленного доступа к данным, обладает кросс-платформенностью и независимостью от операционной системы.

Литература

1. *Theodore Hazlett*. Lecture FCS. Introduction to Fluorescence Correlation Spectroscopy / Genova, Italy, 2004.
2. *Thorsten Wohland, Rudolf Rigler, Horst Vogel*. Standard Deviation in Fluorescence Correlation Spectroscopy // Biophysical Journal. Vol. 80. 2001.
3. *Bo Huang, Thomas D. Perroud, Richard N. Zare*. Photon Counting Histogram: One-Photon Excitation / ChemPhysChem., 2004.
4. *Joachim D. Müller*. Cumulant Analysis in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy // Biophysical Journal. Vol. 86. 2004.
5. *В. В. Скакун*. Системы управления базами данных. Учебное пособие.
6. *Кей С. Хорстман, Гари Корнелл*. Java 2. Том 2. Основы // Sun Microsystems Press. Вильямс. М., 2006.

АНАЛИЗ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ФИЛАМЕНТ АКТИНА С БЛОКИРУЮЩИМ ПРОТЕИНОМ

В. В. Баранов

ВВЕДЕНИЕ

Процесс формирования нитевидных полимеров белка актина (актин-филамент) играет ключевую роль в работе клеток: формировании цитоскелета, движении клеток и их делении. Кроме того, некоторые патогенные организмы, например *Listeria monocytogenes*, используют актин-полимеризацию для движения в зараженных клетках [1]. Подвижность раковых клеток и метастазирование опухолей в значительной степени обусловлены этим процессом. Динамика актин-полимеризации достаточно сложна и объединение мономеров в филаменты трудно описываемо.

Целью данной работы является нахождение и анализ стационарного состояния системы полимеризующихся актинов в присутствии блокирующего протеина. Эти результаты легко применимы для вычисления скоростей реакций по экспериментальным данным; также они будут полезны при тестировании других моделей, в частности, при рассмотрении механических эффектов в клетке, связанных с полимеризацией актина.

МЕХАНИЗМЫ АКТИН-ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Актин – это один из самых распространенных белков, являющийся основой клеточного скелета. Актины формируют длинные нитевидные полимеры – филаменты. Он может быть представлен в двух формах: гло-