

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В БИОТЕХНОЛОГИИ: ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МИКРООРГАНИЗМОВ И ПОЛИМЕРОВ

Маркосян Р., Африкян Э.

Институт микробиологии НАН РА

В работе описывается информационно-аналитическая система микроорганизмов и синтетических полимеров. Обсуждаются возможности таксономического модуля системы, реализующего процедуры нумерической таксономии, где среди критериев отбора включены также данные по взаимодействию микроб-полимер.

Մարկոսյան Ռ., Աֆրիկյան Է., Հաշվողական մեթոդներ կենսատեխնոլոգիայում մանրէների և պոլիմերների փոխազդեցություն: Աշխատանքում նկարագրվում է մանրէների և սինթետիկ պոլիմերների տեղեկատվական կերպով համակարգը: Զննարկվում են համակարգի թվային տարաբնույթի պրոցեսները՝ իրականացնող տարաբնույթական մոդուլի հնարավորությունները, որ այլ չափանիշների շարքում ներառված են մանրէ-պոլիմեր փոխազդեցության տվյալները:

Markosyan R., Afrikyan E. Calculation methods in biotechnology: microorganism-polymer interactions. The informational analytical system of microorganisms and synthetic polymers is described. The possibility of taxonomic module, which is realizing the quantitative taxonomy procedures with the criteria of data on microorganism-polymer interactions, is discussed.

Синтетические неметаллические материалы (полимеры) широко применяются в различных областях техники: в авиации, судостроении, машиностроении, радиотехнике, в различных конструкциях и приборах, для защиты от атмосферного воздействия и коррозионного разрушения, герметизации и др. Увеличивающиеся объемы производства синтетических полимеров и химических веществ (более 300 млн. тонн ежегодно) представляют большую экологическую опасность. Очистка загрязненных территорий имеет очень важное и актуальное значение. При этом существующие традиционные методы не только зачастую не приводят к желаемым результатам, но и требуют огромных затрат. Так, например, по данным из отчета Национального совета по науке и технике, только в США, по предварительным расчетам, для очистки известных загрязненных территорий (почва, водоемы и др.), находящихся в федеральной собственности, с помощью традиционных методов требуется примерно 450 миллиардов долларов. Для очистки всех загрязненных территорий (федеральных и нефедеральных) потребуется 1,7 триллиона долларов [1]. Отметим также, что эти затраты экономически не оправдывают себя, поскольку применение традиционных методов влечет за собой внесение и накопление других новых компонентов.

Значительный интерес представляют процессы биоразрушения, в которых микроорганизмы играют ведущую роль. Изучение биостойкости материалов осуществляется комплексными методами, включающими микробиологические, биохимические, физико-химические, материаловедческие и другие исследования. Очевидно, что полноценное проведение исследований в области микробного биоповреждения полимеров в настоящее время невозможно без применения математического аппарата и вычислительной техники, позволяющих создавать целенаправленные базы данных, экспертные системы, системы моделирования и оптимизации процессов, проводить анализ данных и разработать методические подходы для прогнозирования взаимодействия "микроорганизм - полимер" и связанных с ним процессов.

Нами создана информационная аналитическая система микроорганизмов и синтетических полимеров. Логически систему можно разделить на две части: база данных и программный модуль. База данных является файлом СУБД MS-Access (mdb формат), а программный модуль создан при помощи языка C++ (пакет MS-Visual C++). Связь файла БД и программного модуля реализована при помощи драйвера ODBC [2, 3].

1. База данных, которую в свою очередь логически можно разделить на две взаимосвязанные подбазы: БД микроорганизмов и БД полимеров.

При построении БД микроорганизмов нами использован признанный многими научными центрами в качестве стандарта код РКС для кодирования свойств микроорганизмов [4, 5]. Однако, учитывая многие его недостатки и для более эффективного представления данных, нами впервые при построении БД микроорганизмов применен Описательный Язык (формат) для Таксономии (Description Language for Taxonomy) DELTA [6]. Для эффективной организации представления и кодирования данных нами предложено интегрировать метод РКС и формат DELTA [7].

Данные БД полимеров можно разделить на три основные части:

1. Общая характеристика полимера.
2. Химический состав (полимерные основы и составные части).
3. Различные физико-химические свойства полимеров.

С целью стандартизации и унификации свойств и технических характеристик разработаны соответствующие методические указания и классификатор-кодификатор полимерных материалов для ввода информации в автоматизированные банки данных. БД предоставляет возможность описания свойств полимеров в соответствии с указанным классификатором.

Для организации ввода, вывода, поиска данных построены удобные для пользователя диалоговые окна. Данные основного пользовательского интерфейса программного модуля представлены при помощи иерархической, древовидной структуры (рис. 1).

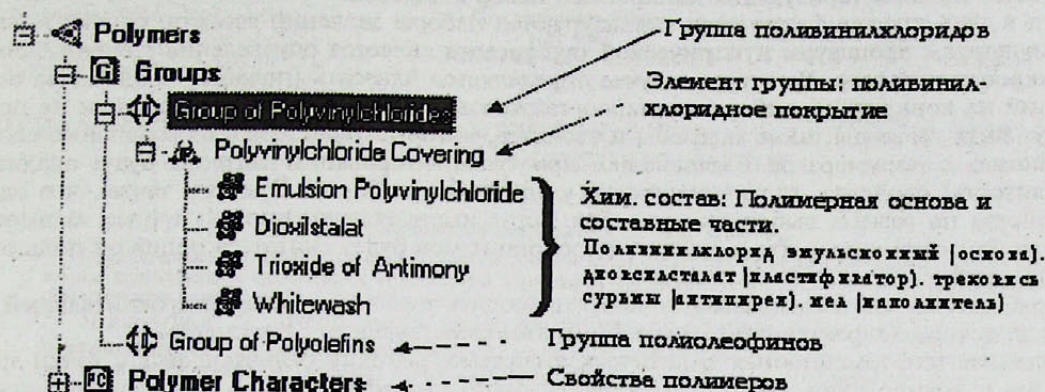


Рис. 1. Интерфейс программы. Иерархическое представление групп полимеров, полимерных основ и составных частей.

БД микроорганизмов и БД полимеров интегрированы между собой соответствующими таблицами, таким образом, описывая взаимосвязь (показатели биодеградации) микробов и полимеров (рис. 2).

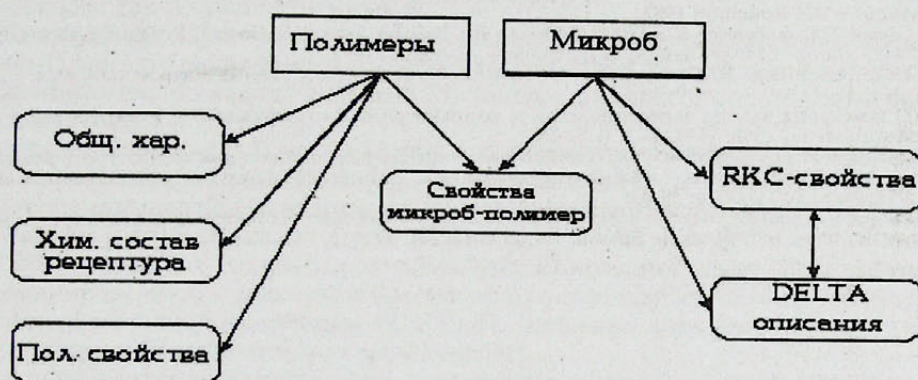


Рис. 2. Принципиальная схема организации БД полимеров и взаимосвязи полимер-микроорганизм.

2. Программный модуль служит для обеспечения удобного графического пользовательского интерфейса системы, ввода и поиска данных, а также для реализации методов кластерного анализа (нумерическая таксономия) [8].

Программа интегрирована с БД микроорганизмов и синтетических полимеров. Работа программы организована в форме мастера (wizard), что существенно облегчает выборку микроорганизмов и свойств, выбор методов анализа, графическое представление, а также возврат к предыдущим этапам анализа. Подробно процедуры нумерического анализа, а также интеграция RKC-DELTA, БД полимеров и микроорганизмов, методы нумерической таксономии и др. нами рассмотрены ранее [7-10].

Учитывая сказанное, считаем целесообразным в настоящем сообщении обсудить также реализацию процедуры нумерического анализа при выборе микробов на основе их взаимодействия с полимерами. Как уже отметили, выбор микроорганизмов и свойств для анализа методами нумерической таксономии осуществляется при помощи так называемого мастера. При этом выбор микробов и свойств может быть осуществлен на основе различных критериев: по различным атрибутам, характеризующим микроб и код RKC, а также на основе имеющихся в базе взаимосвязей между микробами и полимерами. При помощи последнего возможно осуществление отбора и классификация микробов, характеризующихся определенным взаимодействием с полимерами. Установление степени близости микробов-биодеградантов может иметь важное значение для решения вопросов биостойкости. Например, подобный анализ данных позволит достаточно эффективно определить набор свойств и показателей, характеризующих организмы, по наиболее эффективному взаимодействию с тем или иным полимером.

Весьма интересным решением анализа данных является возможность транспонирования матрицы (микроорганизм $\times$ свойство) — вторая опция, при котором дальнейшее продолжение процедуры нумерического анализа будет классификация (определение степени сходства или расстояния) свойств, характеризующих конкретный набор микробов.

Хотя в двух случаях фактически анализируются наборы значений свойств, однако в первом случае результатом процедуры нумерической таксономии является определение степени близости между микроорганизмами. Во втором случае определяется близость (подобие) свойств, на основе их значений на конкретной выборке микроорганизмов. Например, как мы отметили на первом шаге могут быть выбраны такие микробы и свойства, которые характеризуют различные аспекты взаимодействия с полимерами. В дальнейшем при транспонировании матрицы будут анализироваться (близость) свойства, характеризующие конкретную выборку. Отметим также, что одни и те же свойства на разных выборках микробов могут иметь совершенно различные взаимосвязи (показатели близости и др.), что в случае микроорганизмов будет считаться ошибкой пользователя-таксономиста.

Разработанная система позволяет также проводить целенаправленный сравнительный анализ свойств, которые характеризуют микробы, взаимодействующие с полимерами.

Созданная информационная аналитическая система, выгодно отличающаяся с точки зрения организации и кодирования данных, пользовательского интерфейса и др., позволяет решать разные задачи микробиологии, биотехнологии и взаимодействия микроорганизмов с полимерами.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Biotechnology for the 21st Century: New Horizons. — A Report from the Biotechnology Research Subcommittee. Committee on Fundamental Science, National Science and Technology Council, USA (NSTC). — July 1995.
- [2] Вейскас Дж. Эффективная работа с Access 7.0 для Windows 95. (перев. с англ.). СПб.: Питер Пресс, 1997.
- [3] Тихомиров Ю. Visual C++ 6. Новые возможности для программистов. СПб.: БХВ, 1998.
- [4] Rogosa M., Krichevsky M.I., Colwell R.R. Coding Microbiological Data for Computers. — New York: Springer-Verlag, 1986.
- [5] Хачатурян А.А., Котов В.К., Африкан Э.Г. Дескрипторы для создания автоматизированного банка данных культур микроорганизмов. — АН Армении, 1987.
- [6] Dallwitz M.J., Paine T.A. & Zurcher E.J. User's Guide to the DELTA System: a General System for Processing Taxonomic Descriptions. 4.05 edition. CSIRO Division of Entomology, Canberra, 1995.
- [7] Маркосян Р. Интеграция кода RKC и формата DELTA для создания базы данных микроорганизмов. — Биол. жур. Армении, 1999, т. 52, N 3.
- [8] Маркосян Р. О некоторых задачах математической и компьютерной классификации и идентификации микробов. — Журн. Ереванского ун-та, 1998, т. 91, N 2, с. 63-66.
- [9] Маркосян Р.Л., Шукурян С.К., Африкан Э.К. О некоторых подходах информационной технологии в решении вопросов микробной деградации материалов. — Мат. республ. молодеж. науч. конф. "Будущее экологической науки в Армении". Ереван: Изд-во ЕГУ, 2000, с. 49-53.
- [10] Маркосян Р. Информационная система хранения и анализа данных микроорганизмов и полимерных материалов. — Сб. статей молодых науч. сотрудников. Ереван: Наука НАН РА, 1999, с. 141-146.