

УДК 577.151

БИОХИМИЯ

И. М. Зарафян, Г. П. Казанчян, Ж. И. Акопян

### Банк данных по лактатдегидрогеназе

(Представлено академиком АН Армянской ССР Г. Х. Бунятыном 20/X 1980)

Информация по лактатдегидрогеназе (ЛДГ) очень обширна, фермент исследован разносторонне<sup>(1,2)</sup>. Однако манипулирование этой информацией затруднено ввиду отсутствия четкой систематизации и того, что имеющийся в обзорах материал статистически не всегда обработан. Для быстрого, полного и правильного использования имеющейся информации по ЛДГ, крайне необходимой в медицинской практике, мы сочли целесообразным сделать попытку аналитической систематизации имеющейся информации в виде банка данных этого фермента. Подобная методология создания банков данных в настоящее время широко используется во многих областях науки и техники, в том числе и биологии. Так например, банк данных создан для систематизации и хранения белков различного происхождения<sup>(3,4)</sup>.

Структура банка данных по ЛДГ представляет собой машинный файл прямого доступа. Первая запись банка данных содержит две группы информационных списков по ЛДГ. В первую группу списков входят те характеристики фермента, которые являются специфическими:

1) аминокислотный состав; 2) аминокислотная последовательность; 3) ферментативная активность; 4) константа седиментации; 5) коэффициент экстинкции; 6) константа Михаэлиса; 7) константа ингибирования; 8) распределение изоферментов; 9) активность изоферментов.

Ко второй группе списков относятся феноменология и принадлежность фермента: 1) список видов; 2) список тканей; 3) список субстратов; 4) список коферментов; 5) список ингибиторов; 6) список патологий.

Для каждой из характеристик фермента отведено по одной записи, которые заполняются значениями соответствующих характеристик по мере поступления информации. Еще одна запись отведена под матрицу MVT (матрица видов и тканей), элемент (i, j) которой содержит

информацию о ферменте, относящуюся к виду с номером  $i$  в списке видов и к ткани с номером  $j$  в списке тканей. Число ячеек в элементе матрицы MVT равно числу характеристик в банке данных. В зависимости от типа вводимой информации значения характеристик вносятся в соответствующую запись начиная с первой свободной ячейки. Адрес этой ячейки в свою очередь вносится в соответствующую данной записи ячейку элемента матрицы MVT.

Значения характеристики в записи AKSOS (аминокислотный состав) представляют данные качественного и количественного состава аминокислот, входящих в молекулу ферментного белка.

Значения характеристики в записи AKPOS (аминокислотная последовательность) представляют данные по очередности расположения аминокислот в полипептидной цепи ферментного белка.

Ферментативная активность отображена в виде удельной активности очищенных ферментных препаратов ЛДГ, значения которой находятся в записи ACTIV (активность).

В записи CONSED (константа седиментации) представлены значения, полученные в результате аналитического центрифугирования белка, в виде констант седиментации.

Значения коэффициентов экстинкции представлены в записи KEHT, где, кроме того, указаны соответствующие длины волн.

Значения констант Михаэлиса и ингибирования зависят от концентрации субстрата или ингибитора, соответственно, и от ряда других факторов. Поэтому в соответствующих записях CONMI и CONIN кроме значения этих констант указаны также значения концентраций и номера кофермента, субстрата или ингибитора из соответствующих им списков.

Количественная и качественная характеристики изоферментов ЛДГ учтены в зависимости от вида и типа ткани и представлены в записях ISOF и ACTIS, соответственно.

В банк данных внесена также имеющаяся в литературе информация количественного и качественного перераспределения изоферментного состава ЛДГ при различных патологиях по двум параметрам: перераспределению изоферментов ЛДГ<sub>1</sub>, ЛДГ<sub>2</sub>, ЛДГ<sub>3</sub>, ЛДГ<sub>4</sub>, ЛДГ<sub>5</sub> и изменению активности соответствующих изоферментных фракций (увеличению или уменьшению активности).

Данные по изменениям ЛДГ при различных патологиях имеют практическую нацеленность в плане возможной быстрой дифференциальной диагностики по этому ферментативному параметру.

В банк данных внесен список литературы, позволяющий получать не только нужную информацию по ЛДГ, но и ее источник.

Банк данных работает в режиме диалога «машина—пользователь», поэтому его обслуживание не требует знания языков программирования и специальной подготовки. Ввод новой информации осуществляется пользователем по директиве «ВВЕСТИ». В зависимости от типа информации банк данных запрашивает необходимые данные для ввода

информации в соответствующие записи. Типичный пример ввода информации показан на рис. 1. Вывод информации осуществляется дирек-

```
**ВВОДИТЕ ДИРЕКТИВУ
ВВЕСТИ
**ВВОДИТЕ ТИП ИНФОРМАЦИИ
К ЭКСТИНКЦИИ
**УКАЖИТЕ ВИД
ЛЯГУШКА
**УКАЖИТЕ ТКАНЬ
МЫШЦА
**ЗАДАЙТЕ ЗНАЧЕНИЕ КОЭФФ. ЭКСТИНКЦИИ
1.93
**ПРИ КАКОЙ ДЛИНЕ ВОЛНЫ
280
**ВВОДИТЕ ТИП ИНФОРМАЦИИ
С СЕДИМЕНТАЦИИ
**ЗАДАЙТЕ ЗНАЧЕНИЕ CONST СЕДИМЕНТАЦИИ
7.56
**ВВОДИТЕ ТИП ИНФОРМАЦИИ
К МИХАЭЛИСА
**УКАЖИТЕ СУБСТРАТ
ПИРУВАТ
**УКАЖИТЕ КОФЕРМЕНТ
NADH
**УКАЖИТЕ КОНЦЕНТРАЦИЮ
1.E-4
**ЗАДАЙТЕ ЗНАЧЕНИЕ CONST МИХАЭЛИСА
1.4E-4
**ВВОДИТЕ ТИП ИНФОРМАЦИИ
КОНЕЦ
****ИНФОРМАЦИЯ ВВЕДЕНА В БД****
```

Рис. 1. Пример ввода информации по некоторым параметрам ЛДГ

тивной «ПЕЧАТЬ». В зависимости от запроса в режиме диалога создается набор требуемых значений характеристик, который выводится на печать в удобной для пользователя форме (рис. 2).

В настоящей работе описана первая проба создания банка энзиматических данных, и мы сознаем необходимость дальнейшего пополнения банка данных различными ферментативными параметрами. Модель фермента ЛДГ выбрана не случайно, так как, на наш взгляд, это наиболее изученный фермент, имеющий большое значение в медицинской практике. В дальнейшем будет проведена работа по созданию банков данных для набора тех ферментов, которые широко используются как тест-показатели в клиниках. Настоящий банк данных мы рассматриваем как эталонный (контрольный) информативный набор данных для сравнительного анализа нормы и патологий ферментов из различных

ВИД ЛЯГУШКА  
 ТКАНЬ МЫШЦА  
 АМИНОКИСЛОТНЫЙ СОСТАВ

АЛАНИН	16.6	ЛЕЙЦИН	30.0
АРГИНИН	8.0	ЛИЗИН	30.0
АСПАРАГИН	—	МЕТИОНИН	9.5
АСПАРТАТ	32.0	ПРОЛИН	12.6
ВАЛИН	32.0	СЕРИН	28.0
ГИСТИДИН	7.2	ТРЕОНИН	14.5
ГЛИЦИН	25.5	ТИРОЗИН	6.1
ГЛЮТАМАТ	27.0	ТРИПТОФАН	—
ГЛЮТАМИН	—	ФЕНИЛАЛАН	6.5
ИЗОЛЕЙЦИН	23.0	ЦИСТЕИН	—

АКТИВНОСТЬ 1.02E 3

CONST СЕДИМЕНТАЦИИ 7.56

КОЭФФ. ЭКСТИНКЦИИ 1.93 ПРИ ДЛИНЕ ВОЛНЫ 280

CONST МИХАЭЛИСА

СУБСТРАТ	КОФЕРМЕНТ	КОНЦЕНТР.	ЗНАЧЕНИЕ
ПИРУВАТ	NADH	1.E-4	1.4E-4
ЛАКТАТ	NAD	1.E-4	1.2E-2

ЛИТЕРАТУРА

AMAREO PESCE, THOMAS P. FONDY, FRANCYS STOUZENDWACH, FRED CASTILLO AND NATHAN O. KAPLAN COMPARATIVE ENZYMOLOGY OF LACTIC DEHYDROGENASES

JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, VOL. 242, PP. 2151-2167, 1967, USA

Рис. 2. Пример вывода информации по некоторым параметрам ЛДГ

биологических объектов, хранения и статистической обработки информации по исследуемым ферментам, обмена информацией и решения ряда практических задач, которые находятся в стадии реализации.

Институт экспериментальной биологии  
 Академии наук Армянской ССР  
 Вычислительный центр  
 Академии наук Армянской ССР

Ի. Մ. ԶԱՐԱՅՅԱՆ, Գ. Փ. ՂԱԶԱՆՉՅԱՆ, Ժ. Ի. ԶԱԿՈՐՅԱՆ

Լակտատդեհիդրոգենազայի տվյալների բանկը

Փորձ է արված լակտատդեհիդրոգենազայի վերաբերյալ տվյալները անալիտիկորեն սխտեմավորել տվյալների բանկի ձևով: Լակտատդեհիդրոգենազայի տվյալների բանկի կառուցվածքը իրենից ներկայացնում է մեքենայական ֆայլ ուղղակի հասանելիությամբ: Տվյալների բանկը աշխատում է մե-

բենա-օգտվող երկխոսության ուժի մասին և չի պահանջում ծրագրային լեզուների վերաբերյալ գիտելիքներ և առանձնահատուկ պատրաստվածություն: Տվյալների բանկը ունի մեծ գործնական նշանակություն բժշկական պրակտիկայում:

#### ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

- <sup>1</sup> J. Everse, N. O. Kaplan, *Advantees in Enzymology*, p. 62—130, 1973. <sup>2</sup> M. G. Rossman, L. Anders, C.-I. Branden a. o. *The Enzymes*, III ed., vol. 11 (1975). <sup>3</sup> F. H. Allen, O. Kennard, W. D. S. Motherwell a. o. *J. Chem. Doc.*, vol. 13 (1973). <sup>4</sup> F. C. Bernstein, T. F. Koetrl, *Arch. Biochem. and Biophys.*, vol. 185 (1978).