

АНАЛИЗ ИНДУКЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ХЛОРОФИЛЛА С ПОМОЩЬЮ МУЛЬТИЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Биологический факультет, кафедра биофизики,
РФ, 119991, Москва, Ленинские Горы 12, styx@biophys.msu.ru

Широкое распространение при анализе экспериментальных данных по индукции флуоресценции хлорофилла получило представление интенсивности флуоресценции $F(t)$ в виде суммы двух [1] или трёх [2] показательных функций. В основе данного метода лежит представление о существовании линейной электрон-транспортной цепи, в которой перенос электрона может быть описан с использованием формализма кинетики химических реакций первого порядка. Амплитуды и характерные времена показательных функций являются характеристиками состояния фотосинтетического аппарата. Однако численная оценка этих параметров по экспериментальным данным является нетривиальной задачей. В данной работе мы рассмотрели более общую форму, представленную уравнением

$$F(t) = F_0 + \int_0^{\infty} A(\tau)(1 - e^{-t/\tau})d\tau, \quad (1)$$

или его дискретным вариантом

$$F(t) = F_0 + \sum_n^N A_n(1 - e^{-t/\tau_n}). \quad (2)$$

Для численного анализа характерные времена показательных функций τ_n берутся на фиксированной логарифмической сетке ($\tau_{n+1} = k_{\text{step}} \tau_n$). В качестве τ_0 используется время первого отсчёта в экспериментально полученных данных. Использование методов линейной алгебры для решения уравнения (2) относительно A_n приводит к численной нестабильности получаемых результатов, так как оценка меры обусловленности для матрицы $(1 - e^{-t/\tau_n})$ имеет порядок от 10^7 при $k_{\text{step}} = 2$ до 10^{20} при $k_{\text{step}} = 1,1$. В связи с этим было введено дополнительное условие $A_n \geq 0$, которое выполняется для большинства исследуемых образцов. В таком случае уравнение (2) может быть переписано как

$$F(t) = F_0 + \sum_n^N a_n^2(1 - e^{-t/\tau_n}), \quad A_n = a_n^2. \quad (3)$$

Для решения уравнения (3) был использован алгоритм Левенберга–Марквардта, реализованный в пакете SciPy. Предложенный метод анализа данных по индукции флуоресценции хлорофилла реализован в виде модуля для пакета pyPhotoSyn, разработанного авторами. По умолчанию для оценки амплитуд A_n используется не более 500 экспериментально полученных значений интенсивности флуоресценции, время расчёта при $k_{\text{step}} = 1,2$ составляет порядка 20 секунд на обычном персональном компьютере. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-04-00326-а.

Литература

1. *Vredenberg W.J., Prášil O.* Modeling of chlorophyll *a* fluorescence kinetics in plant cells: derivation of a descriptive algorithm / In: Laisk A., Nedbal L., Govindjee (eds) *Photosynthesis in silico: understanding complexity from molecules to ecosystems. Advances in photosynthesis and respiration. Volume 29.* Springer, Dordrecht, 2009, pp. 125–149.
2. *Плюснина Т.Ю., Воронова Е.Н., Гольцев В.Н., Погосян С.И., Яковлева О.В., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.* Редуцированная модель фотосистемы II для оценки характеристик фотосинтетического аппарата по данным индукции флуоресценции // *Компьютерные исследования и моделирование*, 2012, **4**(4), с. 943–958.