

# 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  $\tau_n$  берутся на фиксированной логарифмической сетке ( $\tau_{n+1} = k_{\text{step}} \tau_n$ ). В качестве  $\tau_0$  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.