

те, без каких-либо средств принудительного гидравлического перемещения взвеси. Развиваемый подход, основанный на использовании собственного движения клеток для регистрации их реакций, сначала позволил определять концентрацию подвижных микроорганизмов, а затем их распределение по пространству кюветы.

Выводы: В статье описаны новые виды аппаратных средств и методы обработки информации, позволившие наглядно за счет регистрации локомоций микроорганизмов отразить изменение структуры популяции инфузорий при различных видах таксисов. Методы и средства могут быть применены в области биотехнологии, токсикологии, экотоксикологии, биотестирования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Shapiro H. M.* Practical Flow Cytometry (2-nd Edition). New York: Alan R. Liss Inc. 1988.
2. Биосенсорные системы в медицине и экологии/ Захаров И.С., Пожаров А.В., Гурская Т.В, Финогенов А.Д., – СПб: СПбГУТ, 2003.
3. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В.* Способ биотестирования токсичности водной среды, Патент РФ №2123693, Бюл. изобр. №35.
4. *Понечителев Е.П., Чигирёв Б.И.* Комплекс для исследования динамики развития микроорганизмов // Приборы для контроля окружающей среды и биоинформации. Минвуз: Сб. ЛЭТИ. – Л., 1979. – С. 85–89.
5. *Ogawa, N., Oki, H., Hashimoto, K., Ishikawa, M.,* 2005. Microbotic visual control of motile cells using high-speed tracking system. IEEE Trans, Robotics 21(4), P. 704–712.
6. *Скибенко В.В.* Методы и устройства для определения подвижности микроорганизмов при оценке активности химических соединений. – М., 1982 (Хим. – фарм. Пром-сть: Обзорная инф. ЦБНТИ, вып. 6).
7. *P.G. Wells, C. Blaise,* Microscale Testing in aquatic Toxicology. 1998.
8. *Ковалевская А.С., Казанцева А.Г., Голядкин С.В., Петрова Д.И.* Определение токсичности водных сред по реакции гальванотаксиса // Известия СПбГЭТУ. Сер. «Биотехнические системы в медицине и экологии». – 2006. – №3. – С. 73–77.
9. *Завгородний А.В.* Алгоритмическое обеспечение программно-аппаратного комплекса для определения концентрации подвижных микроорганизмов // Известия СПбГЭТУ. Сер. «Биотехнические системы в медицине и экологии». – 2008. – №2. – С. 55–62.

УДК 004.274+004.932

А.С. Писарев

МНОГОАГЕНТНАЯ P2P GRID-ИНФРАСТРУКТУРА ДЛЯ РАЗВИТИЯ НАНОБИОТЕХНОЛОГИЙ*

В настоящее время в соответствии с ФЦП "Развитие инфраструктуры nanoиндустрии Российской Федерации на 2008–2010 годы" актуальным направлением является развитие информационно-аналитической составляющей инфраструктуры nanoиндустрии. В данной работе рассматривается опыт многоагентного подхода при создании электронной сервисной инфраструктуры для молекулярно-биологических систем (e-СИМБИОС). Создаваемые

* Работа выполнена при частичной поддержке гранта института здоровья США RR07801, гранта Нидерландского научного общества и РФФИ 047.011.2004.013, гранта РФФИ 08-07-90001-Бел_А

мая киберинфраструктура нанобиотехнологий в образовательных учреждениях РФ, США, Голландии способствует созданию механизмов международной интеграции и формированию механизмов повышения конкурентоспособности российских образовательных учреждений в области нанотехнологий и nanoиндустрии.

В биологии доля визуальной информации составляет порядка 70 % всех получаемых данных. В последние годы широкое применение компьютеров и устройств для цифрового ввода изображений привело к накоплению большого объема данных. Таким образом, разработка киберинфраструктуры нанобиотехнологий для распределенной обработки и анализа визуальной информации является важной задачей для компьютерной биологии (A.Pisarev et al., 2005; A.Pisarev et al., 2003).

Актуальность задачи обусловлена также тем, что в настоящее время при огромном интересе к технологиям, использующим распределенные и параллельные вычисления (RPC, CORBA, RMI, XML-RPC, SOA, MPI, FIPA, GRID и др.), существует явный разрыв между значительным количеством реализованных систем и практическим отсутствием общепризнанной методологии и технологии создания на их основе интегрированной адаптивной киберинфраструктуры с элементами самоорганизации.

Под адаптивной киберинфраструктурой с элементами самоорганизации в проекте понимается многоагентная система, интегрированная с гетерогенными системами распределенных вычислений и хранения данных, способная совершенствовать свою структуру и алгоритмы функционирования без непосредственного участия человека для скоординированного достижения поставленных целей в условиях неопределенной и динамично изменяющейся среды.

Несмотря на то, что ряд исследовательских групп во всем мире уже несколько лет работает над этой проблемой и существует несколько подходов, основанных на различных парадигмах, пока не получивших всеобщего признания, остается ряд нерешенных вопросов в области методологии и технологии разработки.

Перечисленные выше технологии в настоящее время не могут обеспечить необходимый уровень семантической интеграции, устойчивости к отказам, требуемые характеристики времен ответа, готовности систем и эффективность комплексной распределенной обработки изображений и моделирования. Необходимо развитие методологии и технологий для описания, обнаружения, композиции, мониторинга, управления и адаптации распределенных сервисов. В GRID-сообществе основное внимание уделяется интероперабельной инфраструктуре и инструментарию, обеспечивающему безопасное и надежное разделение ресурсов внутри динамических и географически распределенных виртуальных организаций. В агент-сообществе основные интересы определяют вопросы скоординированного взаимодействия автономных агентов, которые могут гибко оперировать в неопределенных и изменяющихся условиях. Интеграция концепций CORBA, RMI, SOA, OGSA, REST с многоагентным подходом позволяет реализовать свойства адаптации и самоорганизации в создаваемой киберинфраструктуре.

При разработке e-СИМБИОС были сформированы методология и технология создания адаптивной многоагентной киберинфраструктуры с элементами самоорганизации для распределенной обработки изображений и компьютерного моделирования в области постгеномной системной биологии. Были расширены логический и онтологический уровни методологии IDEF, разработаны инструментальные средства на основе технологии MVC и ПЕГАС/ГРАФИТ [T.Gavrilova et al., 2000].

Обоснованность применения многоагентного подхода подтверждается также результатами анализа характеристик проблемных сред [S.Russel et al., 2006]. На основе методов интеллектуального анализа были получены обобщающие классификационные правила, применение которых к информационным системам в предметных областях с такими свойствами, как частично наблюдаемая, стохастическая, последовательная, динамическая, дис-

кретная, позволяет классифицировать подход к формированию киберинфраструктуры как многоагентный. В частности, методами ассоциативных правил и решающих деревьев было получено одинаковое условие применения многоагентного подхода: «Если проблемная среда стохастическая И ЕСЛИ проблемная среда дискретная ТО многоагентная система».

Многоагентная информационная система на основе e-СИМБИОС и FlyEx (рис.1) включает: агенты распределенной обработки и анализа (OLAP– On Line Analytical Processing), агенты координации взаимодействий (CA – Coordination Agent), агенты доступа к базам данных (DBA – Data Base Agent), сервер загрузки данных (DS – Download Server), серверы обработки изображений (ISA – Image Server Agent), агенты интерфейса пользователей (UIA – User Interface Agent, NLP – Natural Language Processing), адаптеры протоколов (XML/RPC,SOA,REST) (рис.2).

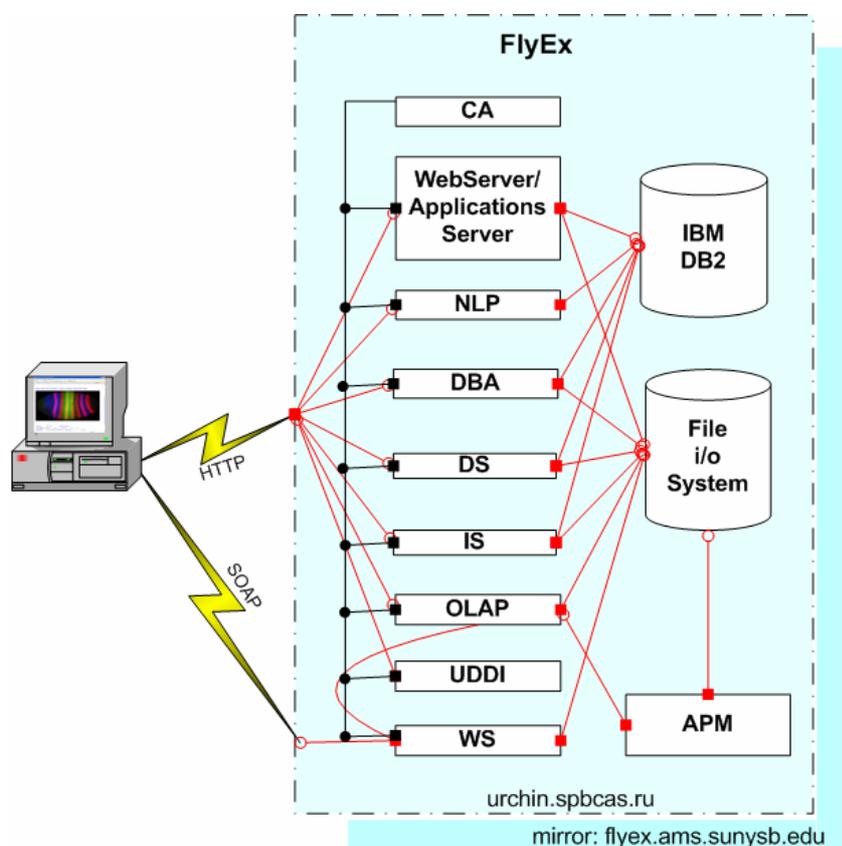


Рис. 1. Многоагентная P2P GRID-архитектура

Информация об агентах и их функциях содержится в базе данных агента координации взаимодействий (CA). Для обеспечения актуальности информации о конфигурации системы все агенты регистрируются у CA, уведомляют CA о плановом отключении или при обнаружении нефункциональности сервисов контрагентов, обновляют информацию о конфигурации системы путем передачи сообщений CA об изменениях текущей нагрузки, CA выполняет мониторинг функциональности системы и уведомляет зарегистрированных агентов об изменениях в конфигурации системы путем посылки сообщений по протоколу HTTP, а администратора системы – по e-mail или SMS.

Взаимодействие агентов не является статическим, а динамически реорганизуется и обеспечивает самореорганизацию системы. Это свойство позволяет расширять функциональность системы в процессе работы и повышать эффективность ее использования.

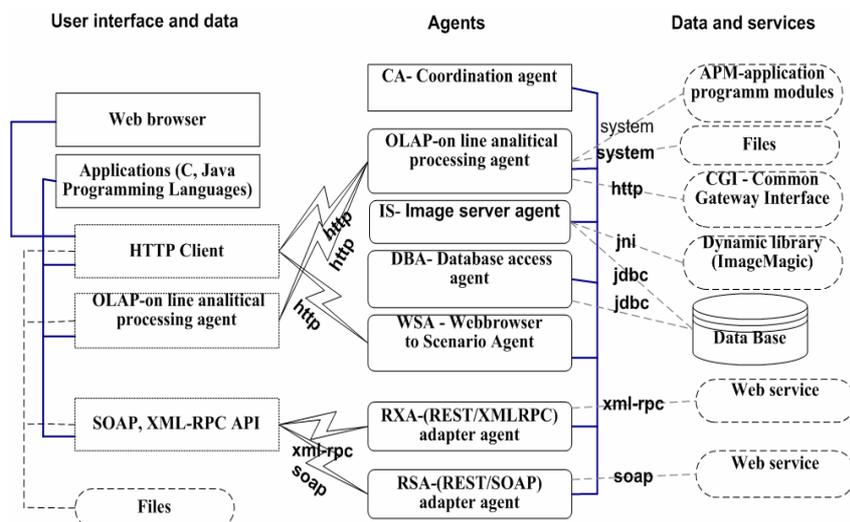


Рис. 2. Интерфейсы между компонентами e-SIMBIOS

При интеграции разнородных информационных и вычислительных ресурсов в качестве основных были применены технологические подходы REST и SOA. При распределенном выполнении сложных сценариев с высокой степенью параллелизма применяется передача сообщений между агентами с логическими указателями на данные, что позволяет повысить производительность обработки изображений и данных.

Использование агентов позволило на принципах одноранговых P2P-сетей создать не требующий выделенных серверов для узлов и облегченный по сравнению с EGEE/RDIG вариант GRID-инфраструктуры.

Инфраструктура e-SIMBIOS применяется для on-line распределенной обработки и анализа биологических изображений, хранимых в файловых системах и базах данных FlyEx [A.Pisarev et al., 2006; E. Poustelnikova et al., 2004], число ежедневных запросов к которым составляет более 1.5 тысяч, в том числе из отечественных и зарубежных образовательных и научных учреждений.

E-SIMBIOS разработан как открытая система, которая легко позволяет добавлять новые методы обработки и анализа и интегрировать возможности, предоставляемые отдельными инструментальными системами обработки изображений. Архитектура системы базируется на многоагентной технологии и позволяет интегрировать данные и методы их обработки, расположенные за FireWall и Proxy servers. Средства обеспечения безопасности функционирования включают контроль по IP адресам, паролям, HTTPS протокол и дополнительное шифрование.

E-SIMBIOS может быть использован локально или для организации сотрудничества исследователей из различных лабораторий в режиме on-line через Интернет. Реализованы как базовые операции с изображениями (масштабирование, вырезка прямоугольных областей, фильтрация по интенсивности, увеличение контрастности и др.), так и проблемно-ориентированные операции (создание комбинированных изображений из нескольких серых изображений, получаемых со сканирующего микроскопа, наложение масок, удаление

фона, регистрация, временная классификация). В настоящее время e-СИМБИОС применяется для обработки и анализа изображений паттернов экспрессии генов мушки дрозофилы, полученных с помощью сканирующего конфокального микроскопа.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *A. Pisarev, M. Blagov, E. Poustelnikova, E. Myasnikova, M. Samsonova.* A system for on-line processing and analysis of images of gene expression patterns (2005). *Pattern Recognition and Image Analysis: Advances in Mathematical Theory and Applications.* – Vol. 15, – №2, – P. 432–435.
2. *A. Pisarev, E. Poustelnikova.* Laboratory information management system for on-line processing and analysis of images of gene expression patterns (2006). *Proceedings of the Saint-Petersburg International Workshop on NanoBiotechnologies, November 27-29, 2006, Saint-Petersburg, Russia,* P. 97–98.
3. *A. Pisarev, E. Poustelnikova, M. Samsonova, P. Baumann.* Mooshka: a system for management of multidimensional gene expression data in situ (2003). *Information Systems.* – Vol. 28. – № 4. – P. 269–285.
4. *E. Poustelnikova, A. Pisarev, M. Blagov, M. Samsonova, J. Reinitz* (2004). A database for management of gene expression data in situ. *Bioinformatics,* 20: 2212–2221.
5. *T. Gavrilova, V. Horoshevsky.* Knowledge bases of intellectual systems (2000). – SPb.: Piter, – 2000, – 384 p.
6. *S. Russell, P. Norvig.* Artificial Intelligence: A Modern Approach (2006). Prentice Hall – 2006, – 1057 p.

УДК 539.1:[577.127.4:543.42]

Р.С. Насибуллин, Р.Р. Шарафутдинова

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСА КВЕРЦЕТИН-ФОСФАТИДИЛХОЛИН

Флавоноиды являются биоактивными соединениями растительного происхождения, обладающими широким спектром активности. В настоящее время выделено и идентифицировано свыше 8000 молекул этого класса и это количество непрерывно увеличивается [1–3]. Они проявляют противомикробную, противоаллергическую, противовирусную и другие виды активности [4–6]. Они также способны нейтрализовывать гидроксильные радикалы. [7].

Исследователи отметили свыше 40 видов биологической активности флавоноидов. Тем не менее, в литературе содержится мало сведений о молекулярном механизме действия этой группы соединений на клеточные мембраны, а место их локализации является предметом дискуссии.

В предыдущих работах было показано, что сопряженные системы, какими являются и флавоноиды, образуют комплексы с клеточными фосфолипидами посредством системы π -электронов [8, 9]. Такой механизм комплексообразования дает возможность объяснить сохранение биологической активности при значительных изменениях заместителей, когда возникают стерические препятствия для сближения активных центров на расстояние, необходимое для образования водородной связи. В данной работе приводятся результаты, касающиеся комплекса, образующегося за счет взаимодействия π - системы электронов ароматических циклов 3,5,7,3',4'- пентаоксифлавонола (кверцетин) с холиновой группой клеточного фосфатидилхолина (ФХ) (рис. 1).

Материалы и методы. Исследование взаимодействия кверцетина с лецитином проводилось методами квантовой химии и ЯМР-спектроскопии на ядрах ^{13}C и ^1H .