

7. A KGST BIOFIZIKAI EGYÜTTMŰKÖDÉS

A KGST Biofizikai Együttműködés létrejöttéről, irányítóiról, tervezett témáiról az 1972. Értesítő 61–64. oldalán közöltünk beszámolót. Most az azóta eltelt évek sokirányú munkáját ismertetjük.

KGST BIOFIZIKAI EGYÜTTMŰKÖDÉS EREDMÉNYEI

A KGST Biofizikai Együttműködés főirányainak, tematikai munkatervének elfogadása után a résztvevő intézetek szakembereinek részvételével megkezdődött a konkrét feladatok, részmunkák felosztása és időbeli ütemezése a szocialista országok biofizikus kutatóhelyi sajátosságainak figyelembevételével. Az Együttműködés sokban elősegítette az azonos, vagy hasonló témán dolgozó bel- és külföldi kutatók személyes információcseréjét, a kutatási feladatok eredményesebb és gyorsabb megoldását, mivel a kutatási lehetőségek ismeretében egyes részfeladatok elvégzésére kutatócserre, tanulmányutak révén további lehetőség nyílt. (A KGST tagországoknak és Jugoszláviának a Biofizikai Együttműködésben résztvevő intézeteiről, kutatóiról, műszerezettségéről – az unikális műszerek kiemelésével – 1974. évben az Együttműködés Koordinációs Központja munkatársainak segítségével Információs Kézikönyv készült.

Az Együttműködés öt főirányában 12 témában vettek részt magyar intézetek. A kutatások eredményeit és a következő tervperiódus részletes munkatervét évente, szimpóziummal egybekötött, ún. munkatervösszeállító és eredménymegvitató szakértői értekezleteken értékelték a részfeladatok megoldásában közvetlenül érdekelt kutatók. Közös kutatások végzésére több szocialista országból érkeztek szakemberek az Együttműködés keretén belül hazai intézetekhez, és kutatóink is szép számmal vettek részt hosszabb-rövidebb tanulmányúton. Meg kell mondanunk azonban, hogy az Együttműködésben tervezett tanulmányút-kiküldetési tervünket nem mindig sikerült teljesíteni.

A KGST Biofizikai Együttműködés Meghatalmazottainak Tanácsa évente kétszer ülésezik, megvitatja a hatékonyabb kutatómunka biztosításához szükséges szervezési kérdéseket, jóváhagyja a szakértői értekezleteken készített éves lebontású munkaterveket, értékeli a Koordinációs Központ munkáját. A Meghatalmazottak Tanácsa IV. budapesti ülésétől kezdve, minden értekezletén meghallgatja egy adott főirány vagy téma legújabb tudományos eredményeit szimpózium formájában. A kutatási feladatok mellett a Biofizikai Együttműködés tudományos prognosztikai tevékenységet is folytat, jelen öt éves együttműködési periódus alatt elkészült – hazai és külföldi szakemberek alapos munkája segítségével – a Biofizikai Kutatások Prognózisa 1980 évig. A Prognózis tervezetét a Meghatalmazottak Tanácsa VI. ülése hagyta jóvá. A Prognózist a tudomány fejlődésének megfelelően a Koordinációs Központ kiegészíti, módosítja.

A KGST Biofizikai Együttműködés kutatási eredményeit, és az eseményeivel kapcsolatos tájékoztatót az Együttműködés folyóirata, a „Studia biophysica” közli. A Szerkesztőbizottság tagjai az egyes országok meghatalmazott képviselői. A folyóirat munkáját és a szervezési feladatokat a Meghatalmazottak Tanácsa évente egyszer megtárgyalja.

Az Együttműködés tevékenysége a jövő biofizikus kutatóinak képzésével, valamint a biofizikus káderek továbbképzésével kapcsolatos problémák elemzésére is

kiterjed. Ezzel kapcsolatban 1973-ban Puscsinóban (SZU) káderképzési értekezletet hívtak össze, azért, hogy összehangolják a szocialista országok biofizikus-képzésének tematikáját, megvitassák a tapasztalatokat, emeljék, egységesítsék a képzés színvonalát. Az értekezlet anyaga könyv formájában is megjelent. Az értekezlet jóváhagyta egy szocialista országok tudósaiából álló szerzőkolléktíva által készített biofizikai kézikönyv megírásának tervét.

A káderképzés felelős intézményei hazánkban a Biofizikai Együttműködésen belül az MTA Biofizikai Bizottsága és a Magyar Biofizikai Társaság. Az értekezletet a szocialista országokban, így hazánkban is egy felmérés előzte meg, amelyben komoly segítséget nyújtottak a biofizikát oktató intézmények vezetői és oktatói.

Az 1973-as felmérés az alábbiakat állapította meg:

Hazánkban a biofizikai kutatásoknak régi és komoly hagyományai vannak. Ennek megfelelően a biofizika oktatása is viszonylag széles körű.

1961-ben alakult meg a Magyar Biofizikai Társaság, amely egyik fő feladatának tekintette biofizikusokat képező bázisok létrehozását. 1961-ben mindössze egyetlen biofizikai tanszék volt, a Pécsi Orvostudományi Egyetemen, 10 évvel később, 1971-ben már újabb 3 egyetemi tanszéket hoztak létre: a Semmelweis Orvostudományi Egyetemen, Budapesten, a József Attila Tudományegyetemen, Szegeden és a Debreceni Orvostudományi Egyetemen. Mindez a magyar biofizikusok képzés eredményes fejlődéséről tanúskodik.

Rendszeres biofizikusokképzés folyik (átlagosan 8 szakember évente) két egyetem természettudományi karán és az orvosegyetemeken (évente átlag 4 biofizikus).

Ezenkívül minden biológus hallgató és orvostanhallgató 2 félév általános biofizikát hallgat és vizsgázik belőle. Az orvostanhallgatók számára ezen felül egy félév biometria kötelező (heti 2 órában).

A biofizika kurzus elméleti és gyakorlati képzést ad: az elméletet heti 2 órában – a gyakorlatot heti 4 órában tartják. Az alábbi tankönyvek és segédanyagok állnak a hallgatók rendelkezésére:

Ernst J.: Bevezetés a biofizikába (2. kiadás)

Tarján, I.: Fizika orvosok és biológusok számára.

Szalay J.: Biofizika gyakorlatok (jegyzet)

Tigyi J.: Biofizika gyakorlatok (jegyzet)

A Budapesti Orvostudományi Egyetem Biofizikai Intézetének kolléktívája által készített: Biofizikai gyakorlatok (jegyzet).

Belágyi J.: Biometria (jegyzet)

Hajtmann B.: Biometria.

(Azóta már megjelent az Ernst J. akadémikus irányításával, szerzőkolléktíva által készített új, Biofizika című könyv is.)

A biofizikusokképzést segítik elő az egyetemek biofizikai tanszékein a biofizika egyes fejezeteit és legújabb eredményeit részletesen ismertető speciálkollégiumok is.

A biofizikusok továbbképzését szolgálják a Magyar Biofizikai Társaság által szervezett klubdelutánok is. A delutánok programjába többször beiktattak olyan előadásokat, amelyeket az egyes KGST országok hazánkban tartózkodó kutatói tartottak munkaterületük legújabb, megfelelő irodalmi háttérű eredményeiről.

A Magyar Biofizikai Társaság kétévenként megrendezett vándorgyűlése, és a fiatal kutatók számára időszakosan meghirdetett pályázatok jelentős eszközei a biofizikusok szakmai továbbképzésének.

A Tudományos Minősítő Bizottság évente hirdet pályázatot bel- és külföldi aspirantúrára: jelenleg 6 biofizikus aspiráns dolgozik kandidátusi disszertációján.

A felmérés során a kádertovábbképzést érintő értékes javaslatok születtek:

1. A KGST Biofizikai Együtműködés egyes főirányain belül együttműködő intézetekbe ellátogató szakembereket fel kellene kérni, hogy saját kutatási területekről tartsanak 45–60 perces, szélesebb kört érintő, összefoglaló előadásokat, hasonlóan az MBT klubdelületánjaihoz. Ez a képzési forma a megfelelő országok Biofizikai Társaságainak keretében megszervezhető.

2. A Szocialista országok fiatal kutatói számára 2–3 évenként ki lehetne írni pályázatot az Együtműködés 5 főirányának megfelelően. A pályamunkák a Studia biophysica által előírt terjedelmű, tartalmú és nyelvű közlemények lehetnének, amelyeket a hazai koordinátor opponensi vélemények alapján történő rangsorolása után a főirány nemzetközi koordinátorhoz juttatnának el. A pályamunkákat a Studia biophysica közölhetné, jutalomként a nyertesek néhány hét tanulmányutat kaphatnának az Együtműködés valamely intézetébe.

3. Vendégelőadókat lehetne meghívni a KGST tagországokból egy-egy speciálkollégium, vagy egy-egy előadás megtartása céljából, vagy az intézetekben tanulmányúton lévő kutatókat fel lehetne kérni egy-egy speciális terület általános összefoglalására, hallgatók számára.

4. Miután szervezett formája létezik, megvalósítható a biofizikus hallgatók (elsősorban tudományos diákkörösök) egy féléves cseréje is a szocialista brigádok között.

A KGST Biofizikai Együtműködés Koordinációs Központja tevékenységéről időenként beszámol a KGST Tudományos Műszaki Együtműködési Bizottságának, a Végrehajtó Tanács ülésén.

Az alábbiakban közöljük a KGST Biofizikai Együtműködés keretében tartott rendezvények összesítését 1972-től:

1972. márc. 20–24. I. 4., I. 6. témák munkatervösszeállító értekezlete
márc. 28–29. Pécs II. 1., II. 2. II. 2. témák munkatervösszeállító értekezlete
ápr. 6–7. Jablonna pod Warszawa I. 1. téma munkatervösszeállító értekezlete
ápr. 5–7. Puscsino I. 3. téma munkatervösszeállító értekezlete.
ápr. 10–14. Brno V. főirány munkatervösszeállító értekezlete
ápr. 25–26. Budapest I. 2. téma munkatervösszeállító értekezlete
máj. 4–5. Szeged I. 5. téma munkatervösszeállító értekezlete
máj. 11–12. Puscsino II. 4. téma munkatervösszeállító értekezlete
máj. 27–30. Bukarest a Meghatalmazottak Tanácsa II. ülése
máj. 28–31. Reinhardsbrunn III. főirány munkatervösszeállító értekezlete.
aug. 7. Moszkva Meghatalmazottak Tanácsa rendkívüli ülése az IUPAB Biofizikai Kongresszus előtt
nov. 14–16. Puscsino UV sugárzás műszerügyi értekezlet
1973. jan. 10–14. Puscsino, Prognózis tervezet készítése
jan. 30–febr. 2. Brno V. főirány munkatervösszeállító és eredménymegvitató értekezlete.
febr. Puscsino III. főirány munkatervösszeállító és eredménymegvitató értekezlete
febr. 20–22. Budapest II. főirány munkatervösszeállító és eredménymegvitató értekezlete.
márc. 20–22. Berlin, a Meghatalmazottak Tanácsa III. ülése
máj. 29.–jún. 2. Jena Konformációváltozások a biopolimerekben szimpózium
jún 3–6. Weimar I. 1. téma munkatervösszeállító és eredménymegvitató értekezlete

- jún. Pucscino „NMR a biológiában”. Nyári iskola
 júl. 24–25. Pucscino „A fotoszintézis kérdései”. Nyári iskola
 szept. 17–29. Brno Molekuláris és sejtsugárbiológiai II. Nyári Iskola
 szept. 25–27. Pucscino Biofizikus oktatási és kádertovábbképzési értekezlet
 október Pucscino „Idegszövettenyésztés” iskola
 nov. 27–29. Budapest A Meghatalmazottak Tanácsa IV. ülése
 A számítástechnika alkalmazása biofizikai kísérletekben (szimpozium). G. R. Ivanyickij és A. P. Anyiszimov itt elhangzott előadásának kivonatát e beszámoló után közöljük.
 nov. 5. Moszkva A szabályozás biofizikai alapjai. Konferencia.
 1974. jan. Moszkva I. főirány eredménymegvitató értekezlet
 febr. 5–6 Moszkva III. főirány szakértői értekezlet
 febr. 17–27. Szklarska Porebna Transzportjelenségek matematikai és biofizikai vizsgáló módszerei. Iskola
 febr. 19–20. Pucscino II. főirány szakértői értekezlet
 ápr. 2–4. Varsó A Meghatalmazottak Tanácsa V. ülése. Kvantummechanikai módszerek alkalmazása a biológiában. Szimpozium.
 máj.–jún. Berlin-Buch Kisszögű Rtg.-szóródás biológiai objektumokon. Iskola
 jún. 3–6. Moszkva Sejt szupramolekuláris struktúrája funkcióinak fizikai-kémiai alapjai. Nyári iskola
 jún. 25–28. Pucscino Biofotometria egységesítése. Nyári iskola
 júl.–aug. Berlin-Buch. Gyors folyamatok kinetikája. Iskola
 szept. 18. Poznan, Lengyelország III. 2. 11. téma munkaterv összeállító értekezlet
 szeptember Palanga Biomembránok. Nyári iskola
 szept. 25–27. Spindleruv-Mlyn (Csehszlovákia) V. főirány szakértői értekezlete
 okt. 1–4. Brno A Meghatalmazottak Tanácsának VI. ülése. A Biofizikai Együttműködés jelentős tudományos eredményei. Szimpozium.
 okt. 8–9. V. főirány eredménymegvitató értekezlet.

A KGST Biofizikai Együttműködés 1975-ben a következő rendezvények megtartását tervezi:

A Meghatalmazottak Tanácsa ülései:

A Meghatalmazottak Tanácsa VII. ülése:

1975. márc. 11–15. Szovjetunió, Moszkva.

A Meghatalmazottak Tanácsa VIII. ülése:

1975. szeptember. Mongólia, Ulán-Bátor.

Az Együttműködés főirányainak eredménymegvitató és munkatervösszeállító szakértői értekezletei:

II. főirány: 1975. május, Magyarország, Budapest

III. főirány: 1975. november, Szovjetunió, Kijev.

V. főirány: 1975. november, Szovjetunió, Moszkva

Az I. és IV. főirány témáinak megvitatására 1976-ban kerül sor.

Iskolák, konferenciák:

Elektronmikroszkópos autoradiográfia, 1975. június,

Pécs Magyarország

Bioenergetika és a mitochondriumok metabolizmusa

5. kollokvium, 1975. Bulgária

Biofizikai és biokémiai öszzövetségi konferencia
1975. június, Puscsino, Szovjetunió
Magyar Biofizikai Társaság Vándorgyűlése, 1975.
aug. 27–30., Debrecen
Elektromágneses terek hatása biológiai rendszerekre, szimposium. 1975.
október, NDK.

A KGST Biofizikai Együtműködés ötéves terve 1975 végén lejár. Az 1976–80. évekre szóló munkaterv javaslatot a Meghatalmazottak Tanácsa VII. ülése tárgyalja meg

BANCZEROWSKI JANUSZNÉ
a KGST Biofizikai Együtműködés
magyar tudományos titkára

A biofizikai együtműködés szempontjából is jelentős, hogy a KGST Tudományos-Műszaki Együtműködési Bizottság VIII. ülése (1974. július, Szófia) megvizsgálta a bionika területén tervezett együtműködésre vonatkozó javaslatokat. Egyetértett „*A bionika főirányában folyó kutatások fejlődési tendenciái*” című, 1980-ig szóló prognózissal, amit a KGST tagországok szakértőinek második értekezletén dolgoztak ki Moszkvában, 1973 februárjában; s úgy határozott, hogy 1975 szeptemberében Várnában megrendezi a Nemzetközi Bionikai Konferenciát.

SZÁMÍTÁSTECHNIKA ALKALMAZÁSA BIOFIZIKAI KÍSÉRLETEKBEN

(A KGST Meghatalmazottak Tanácsának
IV. üléséhez kapcsolódó szimpózium)
Budapest, 1973. november 28.

Biológiai struktúrák vizsgálatának automatizálása

(Kivonat)

G. R. Ivanyickij

Az utóbbi években jelentős eredmények születtek a biológiai kutatások automatizálása terén; ez pedig az elektronikus számítógépek alkalmazásával függ össze. Konkrétan a Szovjetunióban, egy információ-méréstechnikai rendszer áll kidolgozás alatt, amely a következő al-rendszereket foglalja magában:

a) a kromoszómákról scanning technikával nyerhető információk felvételére szolgáló alrendszer a kariotípus automatikus rekonstrukcióját végzi;

b) a mikroorganizmusok tenyésztésben történő operatív, mikroszkópos elemzését megvalósító alrendszer;

c) a szív- és érrendszeri megbetegedések centralizált elektrokardiográfiás diagnosztizálására szolgáló alrendszer;

d) biológiai objektumokról nyert spektrum-adatok feldolgozását végző alrendszer;

e) az intézet terv- és pénzügyi tevékenységét irányító automatizált alrendszer;

Természetesnek tűnik az az elvárás, hogy a szocialista országok viszonylatában összehangolt, újabb, komplexebb rendszerek kidolgozására kerüljön sor. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy a biológiai kutatások automatizálásának kérdését nem lehet elválasztani a technikában megvalósuló automatizálás általános fejlesztési problémáitól.

Jelen előadásban áttekintést nyújtunk a számítástechnika alkalmazásáról a biofizikai kutatások terén, az 1972-ben Moszkvában tartott IV. Nemzetközi Biofizikai Kongresszus keretében megrendezett speciális szimpózium anyaga alapján. A szimpóziumon elhangzott előadások felölelték a számítógépek biofizikai alkalmazásának egész területét.

J. D. McCann professzor, a Kaliforniai Műszaki Egyetem (CALTEC, USA) tanára a számítástechnika idegrendszeri kutatásokban történő felhasználásának újabb lehetőségeiről beszélt. *S. D. Barry*, fiatal angol kutató az Oxfordi Egyetem Kutatócsoportja nevében tartott előadást. Előadása a display-ek alkalmazásával foglalkozott biológiai struktúrák molekuláris átrendeződéseinek vizsgálata kapcsán. A harmadik előadást *V. F. Raub*, a bethesdai Amerikai Nemzeti Egészségügyi Központ kutatója tartotta. Előadása a számítógépeknek a farmakológiai információk feldolgozásában történő alkalmazásáról szólt. Napjainkban az újabb és újabb gyógyszerek

szintézise és a már létrehozott gyógyszerek körültekintő vizsgálata egyre bonyolultabbá válik, mivel több százezer olyan készítmény létezik, amely kémiai struktúrájától függően, valamilyen biológiai hatással rendelkezik. A negyedik előadást egy holland orvos-fizikus, dr. P. G. Hügenbold tartotta; ő a Rotterdami Egyetemi Klinikán dolgozó szakemberek munkáját ismertette: a számítógépeknek intenzív osztályokon, a betegellenőrzésben történő felhasználásáról beszélt. Engem személy szerint az a megtiszteltetés ért, hogy ezen a szimpóziumon előadásommal a szovjet biofizikusokat képviseljem. Előadásom címe: „Biológiai struktúrák gépi analízise” volt; tartalmának ismertetésére a későbbiekben visszatérek.

A korszerű számítógép kritériumai

(E fejezetben az előadó ismertette a Szovjetunióban kifejlesztett első, második és harmadik generációs számítógépek jellemző tulajdonságait.)

A számítástechnika alkalmazása a molekuláris biofizikában.

Talán nem túlozunk, ha azt állítjuk, hogy az élő anyag molekuláris szintű kutatásával kapcsolatos, legjelentősebb biológiai eredmények a számítógépek alkalmazásával függenek össze. Néhány munka ezek közül: a DNS kettős-spirál struktúra megállapítása, egyes fehérjék, mint pl. a mioglobín, a hemoglobín; a lizozim és sok egyéb fehérje struktúrájának meghatározása.

Még 1966-ban Bécsben, a II. Nemzetközi Biofizikai Kongresszuson bemutatták egyes biológiai makromolekulák struktúrájának sztereoszkóp atlaszát, amelyet számítógép segítségével állítottak össze. Ismeretes, hogy a röntgendiffrakciós analízis az egyik olyan alapvető módszer, amely részletes információt szolgáltat a nukleinsav és fehérjemolekulák konfigurációjáról. A Nobel-díjas Kendrew például a mioglobín szerkezetének megállapításakor (2 Å felbontás) a számításoknál több, mint $9 \cdot 10^3$ diffrakciós maximumot vett figyelembe. Számítógép nélkül képtelenség ilyen számításokat elvégezni. Sok kutató érdeklődését felkeltette ezért annak lehetősége, hogy a fehérje molekula szerkezetét röntgendiffrakciós elemzés nélkül, kémiai képlete alapján meg lehet állapítani. Ez a feladat azonban rendkívül nehéz. Két megoldási lehetőség adódik: egyrészt, nagyobb megszorításokat kell találni és alkalmazni a fehérjemolekulák szerkezetkutatásában, másrészt a lehetséges variánsok kiválogatását, áttekintését az emberi intuícóra is építve maximálisan automatizálni kell.

A fehérjemolekulában például minden egyes láncszem meghatározott hosszúságú, a kötések térbeli elrendezése determinált. A fehérjemolekulák szintézise a polipeptidlánc meghatározott végén kezdődik. A polipeptidláncok spirálképződési tendenciát mutatnak. Végül, a fehérjemolekula egészében olyan formát igyekszik felvenni, amely mellett a molekula szabadenergiája az adott közeg feltételei mellett minimális. Ezek a tételek számítógép segítségével formalizálhatók, aminek eredményeként a gép a képernyőre kirajzolja a molekula feltételezhető modelljét, az ember pedig, ismereteinek és tapasztalatának felhasználásával eldönti, hogy a modell kielégítő, vagy sem.

A képernyő csupán kétdimenziós síkbeli ábrázolást nyújt. A gépnek ezért a molekulát tengelye körül forgatva, a képernyőn egy projekciósorozatot kell leképeznie, amelyek alapján az ember a molekula térbeli képét gondolatilag megalkotja.

A számítógép a minimális szabadenergiájú modell megalkotásánál a molekula térbeli geometriáját leíró minden egyes javasolt variáns esetében értékeli az összenergiát, kiszámolja a deriváltját, hogy a kutató lássa, hogyan kell megváltoztatni

a molekula struktúráját a minimális energia eléréséhez. Az ember változtatja a molekula struktúráját és irányítja a számítás folyamatát. Így tehát létrejön egy „ember-számítógép” kutatórendszer. Egy ilyen rendszer segítségével állították fel például még 10 évvel ezelőtt a miogloblin modelljét, amely jól egyezik Kendrew röntgen-diffrakciós analízis alapján ajánlott modelljével.

A biológiai struktúrák ábrázolásának elemzése.

A kísérletező-felhasználó szempontból a számítógép háromféle módon alkalmazható a kísérletben:

1. a kísérlet a számítógéptől függetlenül folyik
2. „on line” számítógépes kísérlet
3. a gép által irányított kísérlet.

Az amerikai McCann professzor kongresszusi előadása a számítógép által irányított kísérletről szólt, amelyben az objektum egy rovar nagyszámú beépített elektróddal ellátott agya és szeme volt.

Egy másik példa a gép által irányított kísérletek közül a kromoszómák gépi analízise. Erről szól az én előadásom.

A különböző állat- és növényfajok kromoszómaszáma eltérő. Az egyes fajokra meghatározott, forma és genetikai információtartalom tekintetében szigorúan állandó kromoszómakészlet jellemző.

Az ember kromoszómakészlete 46 kromoszómából áll.

A kromoszómakészlet identifikálása a kariotípus fogalmán alapszik. A kariotípus a kromoszómakészlet olyan mennyiségi és minőségi jellemzőinek összességét jelenti, mint a kromoszómák száma, mérete és formája.

Az automatikus kromoszómaelemzéssel kapcsolatos feladatot röviden így foglalhatjuk össze: a metafázisban lévő kromoszóma lemezkéket csoportokra kell bontani és tisztázni kell, miben tér el a kapott rendszerezett táblázat a normálistól. Ezek a kutatások igen hasznosak az öröklődő betegségek diagnosztikája szempontjából, másrészt, a mesterségesen előidézendő kromoszóma aberrációk meghatározásához nélkülözhetetlenek, például a mezőgazdaságban új állat- vagy növényfajok nemesítésénél.

(A következőkben az előadó – a Down- és a Turner-kór példáján keresztül – a kariotípus-aberrációval járó betegségek diagnosztizálásakor elvégzendő feladatokat ismertette.)

A SZUTA Biofizikai Intézetében már kidolgozták a kromoszómák gépi elemzésének rendszerét. Hasonló munkák folynak több külföldi laboratóriumban is.

A kromoszómák gépi elemzését a következő szakaszokra bonthatjuk:

1. A metafázisos lemezke (kromoszómák) képének bevitele a számítógép memóriaegységébe.
2. A metafázisos lemezke egyes objektumainak szétválasztása (individualizálása).
3. A kromoszómák elemzése és mérése.
4. A kromoszómák osztályozása és a kariotípus felépítése (az etalonnal való összehasonlítása).

A kromoszómával kapcsolatos információk beviteléhez az optikai ábrázolást elektromos jelrendszerre kell átalakítani. Ez rendszerint különböző, scanning elven működő berendezésekkel történik.

Berendezésünk képes a preparátum felszínén megkeresni az objektumot, azt kerülete mentén körbejárni, és az objektum területét soronként letapogatni.

A letapogatással információkat kapunk az objektum területének jellegéről, az esetleges lyukakról, nagyobb optikai sűrűséggel rendelkező zárványokról. Az objektumok közti üres szakaszok nem kerülnek a gép memóriájába.

A második lépéstől kezdve minden egyes műveletet számítógép végez.

Jelen munka nem kíván teljes összefoglalót adni a biológiai struktúrák gépi analizésének módszereiről; mindössze néhány példával illusztrált áttekintést nyújt.

A sztereológia és az elektronmikroszkópos vizsgálatok.

A biofizikusok a következő feladat előtt állnak; néhány metszet vagy vetület alapján kell rekonstruálniuk a sejt vagy mikroorganizmus belső struktúráját.

Sztereológián a testek háromdimenziós struktúrájának vizsgálati módszereit értik, olyan esetekben, amikor csak a testek metszetei és síkbeli vetületei ismertek.

A sztereológiai társaság különböző tudományterületek szakembereket, metallográfusokat, petrográfusokat stb., tehát mindazokat, akik az egyes objektumok struktúráját tanulmányozzák.

Ha a számítógépet biológiai szubcelluláris struktúrák elemzésére használjuk, két probléma merül fel:

1. El kell különíteni az analizálandó struktúrát; és az azzal kapcsolatos információkat numerikus formában kell kifejezni.

2. Ki kell dolgozni az információfeldolgozás algoritmusát, a vizsgált struktúra mennyiségi jellemzőinek megállapításához.

A szubcelluláris struktúrák vizsgálatánál minimum három olyan feladattípust különböztetünk meg, amelyek megoldásában az elektronikus számítógépek alkalmazása igen perspektivikusnak látszik.

1. Elektronmikroszkópos felvételeken található objektumok osztályozása és számlálása.

2. Az egyes objektumok térbeli struktúrájáról készített elektronmikroszkópos felvételek mennyiségi leírásához szükséges módszerek kidolgozása.

3. Szubcelluláris struktúraátalakulások dinamikájának tanulmányozására szolgáló módszerek kidolgozása. Ebből a témakörből a közelmúltban a SZUTA levelező tagja, B. K. Vajnstein tekintélyes összefoglalót készített.

Egy új irányzat, a számítógép elektronmikroszkópiái alkalmazásának kezdetén állunk, de már egy sor jelentős eredményt sikerült elérnünk (a fágok és vírusok struktúrájának meghatározása, a riboszóma és egyes makromolekulák struktúrájának rekonstruálása). Eltelik még néhány év, és a biológiai struktúrák numerikus rekonstrukciójának módszere alapvetővé válik az elektronmikroszkópos módszerek elemzésében.

Biológiai objektumok spektrumaiból nyerhető információk gyűjtésének és feldolgozásának automatizálásáról

(Kivonat)

A. P. Anyiszimov

A spektrális módszerek alkalmazásának elterjedése újabb követelményeket állít az adatgyűjtés és a feldolgozás elé. A nagymennyiségű spektrum megfelelő tárolást és operatív feldolgozást igényel, ami számítástechnikai eszközök felhasználása nélkül gyakorlatilag igen nehezen valósítható meg. Jelen tanulmányban számítástechnikai eszközökön alapuló, a spektrumokból nyerhető információk gyűjtésére és feldolgozására alkalmas automatizált rendszert ismertetek.

A fizikai módszereket a biológiai kutatásban széles körben alkalmazzák. A különböző biológiai és a komplex kémiai struktúrák vizsgálatában igen elterjedt a spektrális módszerek alkalmazása, ezek közül a legelterjedtebbek a következők:

- mágneses rezonancia spektroszkópia (mágneses magrezonancia, elektronspin-rezonancia, kettős elektron-mag rezonancia);
- optikai spektroszkópia (a spektrum ultraibolya és infravörös része);
- tömegspektrometria;
- Mössbauer effektus stb.

A spektrális vizsgálatok végcélja a biológiai anyag (objektum) struktúrájának tisztázása. Az elektronikus számítógépek alkalmazási lehetőségeinek sokfélesége lehetővé teszi, hogy a tudományos információ gyűjtésére és feldolgozására automatizált rendszereket hozzanak létre.

Ha áttekintjük a spektroszkópiái kutatások automatizálásának problémáját, elsősorban a technikai eszközök sokféleségével kerülünk szembe, s ez bizonyos nehézségeket okoz az egységes spektrum-információ feldolgozási rendszer követelményeinek kidolgozásában. Ezen túlmenően, a kísérleti objektummal kapcsolatban álló elsődleges berendezések jellege alapján eltérő tömegű és sebességű információra számíthatunk.

A modern spektrométerek adatgyűjtési sebessége 0,1 bit/sec és 20 millió bit/sec határok között mozog. Emellett az egyenkénti adattömeg 100 és 32 000 szó között változhat.

Egy ilyen komplexum speciális programmal való ellátása a tipikus univerzális műveletek elvégzése mellett a következő alapfeladatok megoldását is kell hogy biztosítsa:

- a) néhány mérési eredmény alapján átlagolt spektrumot nyerjünk a jel/zaj viszony megjavítása érdekében;
- b) az elnyelési sáv-maximumok helyzetének meghatározása egy etalon spektrum alapján történő interpolálással;
- c) az elnyelési sáv, jelalak tényleges paramétereinek meghatározása (a műszerfüggés hatásának tekintetbe vétele);
- d) az elnyelési vonalak relatív intenzitásának meghatározása (a maximális intenzitáshoz képest);
- e) relatív elnyelési koefficiens kiszámítása egy megadott elnyelési sávra vonatkozóan;
- f) a spektrumok előállítás a vonalkomponensek jelalakjainak paramétereinek alapján;
- g) a komplex elnyelési sáv felbontása az összetevő vonalkomponensekre (10 vonalig);

- b)* két tetszőleges spektrum összegének (különbségének) képzése;
- i)* az elnyelési sáv második momentumának meghatározása;
- j)* Fourier-spektrum előállítás;
- k)* spektrum-integrálás;
- l)* spektrum-differenciálás;
- m)* a spektrum-simítás műveletének elvégzése;
- n)* a spektrum inverz függvényének megkeresése;
- o)* a spektrum logaritmusának képzése;
- p)* az alapvonal-korrektció elvégzése;
- r)* a fáziskorrektció elvégzése.

A felsorolt feladatok mellett az automatizált rendszernek kvantum-mechanikai spektrumszámításokat és spektrum-identifikálást is tudnia kell végezni.

A felsorolt követelményekből kiindulva nézetünk szerint a legmegfelelőbb spektrum-adatgyűjtési s feldolgozási rendszer a sokszintes rendszer lehet.

A spektroszkópiai kutatások specifikuma a szintek specializálását csak laboratóriumi keretek között kívánja meg.

Ez esetben a rendszer blokk-sémáját a következő formában adhatjuk meg:

A – (1, 2, 3, . . . , k) a laboratóriumi kísérleti berendezések mini-komplexumai;

B – a második szint számítógépe;

C – a mini-komplexumok kapcsolatot tartó berendezései és vonalai a második szintű számítógép felé;

D – kapcsolatot tartó berendezések és vonalak a második szint számítógépei között.

A kísérleti berendezések mini-komplexumai az elsődleges feldolgozást, a spektrum-adatok gyűjtését, valamint a spektroszkópiai műszerekből kapott információk operatív áttekintését és kiválogatását végzik a spektrumoknak a közös könyvtárba történő bevitelére előtt.

Alapvető műszaki követelményekből kiindulva a mini-komplexumnak a következő alaptervezésekből kell állnia:

1. – kísérleti berendezés (spektrométer);
2. – CAMAC típusú interface;
3. – plotter;
4. – megjelenítő pult (display);
5. – mini-computer (az alapkomban).

A szükséges spektrum-felbontás és a felvétel sebessége a mini-komplexum berendezéseinek műszaki paramétereivel szemben a következő követelményeket támasztja:

a) Mini-computer

- gyors működés 1–2 sec;
- memória: 4 K – 32 K szó;
- a szóhosszúság 16 bináris jegy (bit);
- bevétel, adatkiadás: perforátor, lyukszalag (v. lyukkártya), olvasó és lyukasztó, valamint nyomtató berendezések;

b) Megjelenítő pult (display)

- az ábrázolandó betűszimbólumok, számok, grafikonok;
- a megjelenített szimbólumok száma; nem kevesebb, mint 1000,
- a display grafikus részének felbontóképessége 1000x1000,

c) Plotter

- a rajzoló felület nagysága 250x350 mm
- felbontóképesség, 0,3 mm-nél jobb.

A mini-komplexumok paramétereivel szemben támasztott fenti követelményekből is látható esetleges redundanciájuk, ha lassan működő (pl. optikai) spektrométerekkel együtt használjuk őket. Ilyen esetekben ezért egy mini-komplexumot célszerű több spektrométerrel összekapcsolni. Másrészt a közeljövőben még sok esetben megmarad az a szituáció, amelyben nem célszerű, vagy lehetetlen mini-komplexumok alkalmazása spektrométerek vonatkozásában.

Irodalom:

1. IEE Transaction on Nuclear Science. April 1971 Volume NS-18. Nürnberg 2