

基于软物质实验板块的 Labview 编程探索

王誉晨[†]

中山大学 物理学院, 广州, 510275

摘 要

在本研究中, 我们完成了理论建模, 生物样品制备及表征, 磁镊拉伸试验, 发现了拉伸相变中的滞回现象, 及使用 Labview 进行数据处理和分析, 最后通过对于全部实验伙伴数据的分析和统计, 得到关于两个不同 DNA 力学模型拟合参数的统计分布规律。通过该实验板块的训练, 我们了解了软物质实验的基本流程, 深刻感受了关于熵能竞争, 熵弹性等理论概念的具体体现。在本实验中, 个人着迷于编写高效, 美观, 用户体验感良好的 Labview 程序, 并将自己的程序框图, 设计亮点, 以及编程体验记录下来, 分享给大家。

关键词: Labview 编程, 磁镊, PCR, 凝胶电泳

PACS: 74.25.-q

基金: 中山大学物理学专业实验课程资助的课题。

[†] 通讯作者: wangych256@mail2.sysu.edu.cn

1 实验过程

1.1 样品制备

我们使用了聚合酶链式反应 (PCR) 技术, 是一种用于扩增特定 DNA 片段的分子生物学技术, 是生物体外进行的特殊 DNA 复制。

我们在谭创老师的带领下, 沿着实验讲义的流程, 在试管中依次加入了, 原料 dNTP, 模板质粒, 水军前后引物 (在 PCR 过程中, 虽然模板 DNA 双链打开, 但是退火时自己的双链重新合并的是会使得体系能量最小, 但是前后引物依靠数量的优势, 抢占点位, 使得扩增反应可以顺利进行。这个过程体现了熵能竞争), 神奇的昂贵的缓冲液。之后将样品放入集成好的一体化 PCR 机器进行链式扩增反应, 这里的小窍门是完成 34 轮

完整解旋退火之后, 有一个尾巴程序, 多进行一次退火, 可以使得产率大大提升, 这是谭老师的独门秘诀。

通过 PCR 扩增技术获得大量样品后, 可以利用凝胶电泳进行检验。跑胶很酷, 预染很炫, 操作很精细, 战战兢兢。

1.2 磁镊实验

磁镊实验对于力的敏感性要求极高, 可以从实验流程中看到, 马老师搭建的实验桌, 手轻轻托在桌子上就会剧烈放气以示提醒。另外在实验时要提前对拉力进行校准。DNA 拉动过程的记录颇具智慧, 在校准力过程完成之后, 我们有一个保存参考球和磁球的过程, 在保存下所有位置, 保证磁球清晰的图片集后, 我们就建立了磁球与 chamber (由参考球标记) 相对位置与清晰度之间的映射, 于

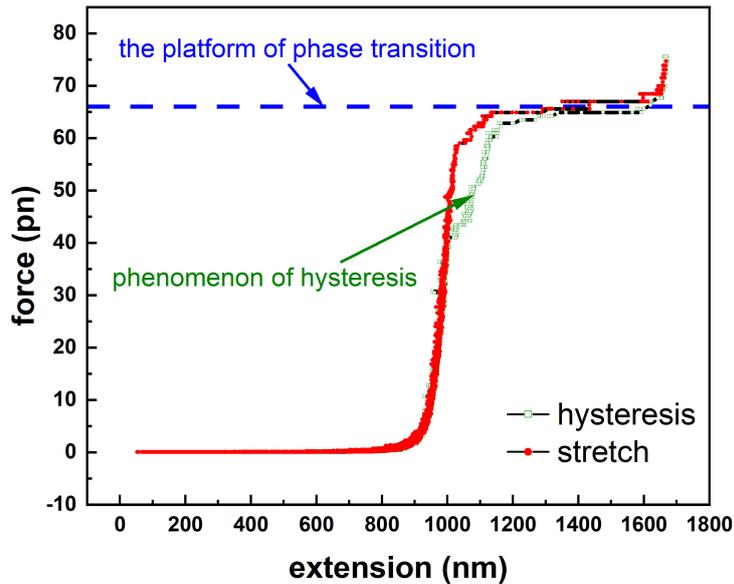


图 1 拉伸曲线

是乎在实验过程中出现了这样情况时如图2，果断另辟蹊径，框选了两个成合在一起的参考球作为参考，而且还得到了不错的数据

将获得的数据经过处理得到如图1的拉伸曲线，相关磁铁位置以及拉伸过程细节可以结合3分析

总结：这个过程体现了熵弹性，一般的橡皮筋收缩到展平的位置就停止，而 DNA 分子，收缩到展平的位置还不够，还会继续收缩至蜷曲的状态，因为蜷曲状态的微观构型多，熵处于极大值。

2 数据处理-Labview 编程

2.1 程序设计思路

通过前两周，DNA 分子的链式扩增反应，磁镊实验，我们获得了双链 DNA 拉伸曲线的实验数据，我们通过编写 Labview 程序进行数据分析，主要步骤如下：1.导入数据：通过路径控件连接转化为双精度数组；2.数据提取：提取磁铁位置和 extension 两列数

组，显示磁镊运行状态图示；3.数据转化：根据校准力公式由磁铁位置计算得到拉伸力数组；4.数据截取：根据磁铁位置将完整拉伸曲线分成外拉部分和恢复部分；5.外部截取：用户通过外部输入拉伸力的上下阈值范围截取想要的部分；6.数据拟合：使用非线性拟合控件拟合数据；7.结果导出：将拟合得到的最佳参数以文件形式保存，方便数据之后的处理与分析；

使用程序的两种不同模型进行拟合得到如图4的拟合结果

2.2 程序技术亮点

1. 两种不同拟合方法的自由切换

- 效果：使用条件结构，通过下拉列表菜单提供布尔的编辑项，实现可以通过前面板的菜单栏选择不同的拟合方式。
- 优势：一方面节省资源，节省空间：使用条件结构储存了不同模型的不

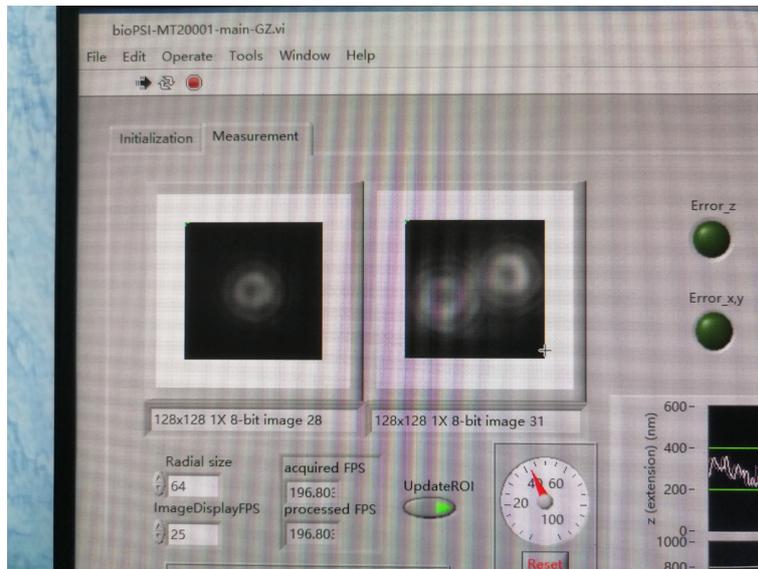


图 2 特殊参考球情形

同拟合方程拟合参数等等，方便用户自由切换，且只使用了一个非线性拟合模块（若不是要实现批量处理数据，我就不会复制了完全相同的两个条件结构），节约运算资源，若是用于实际仪器前面板的设计，则会大大节省前面板的空间。另一方面泛化优势明显，若要增加新的拟合模型，只需要增加一个编辑项，设置模型参数以及切换对自变量拟合（Odijk 模型）还是因变量拟合（Marco-Siggia 模型）的连线即可。

- 实现方式：参考6中部，使用两个条件结构控制了非线性拟合控件的输入输出，以及通过连线的交叉方式体现出对于自变量拟合和对于应变量拟合的不同之处，连线方式的讲究详见[Labview 编程感想](#)。

2. 拟合结果使用文件格式保存

- 效果：选择文件路径，运行程序，在前面板通过观察拟合图表以及拉

伸曲线，排除磁镊实验中失败的数据，决定是否保存该次拟合参数，若想要保留记录该次实验，则按“确定保存”按钮，同时前面板的灯亮起，该组参数将保存在用户设定好的文件中（默认设定是当前数据文件夹下“result.txt”保存最优参数，“name.txt”保存该组数据的文件名包含着校准力信息，文件名及储存位置用户可以自己定义，文件保存控件设置为“在已有文件后添加数据”，若文件名不存在将自动创建文件），随后灯灭，意味着参数写入文件完毕；当处理完所有数据后（大概 100 多组）后，所有的有效实验数据将保存在用户设定好的文件中，用户可以进行后续的数据分析。

- 优势：省时，高效

- 实现方式：如图6右下角部分，最外层是 while 结构，保持程序保持运行，flat sequence 结构（详见[保存控](#)

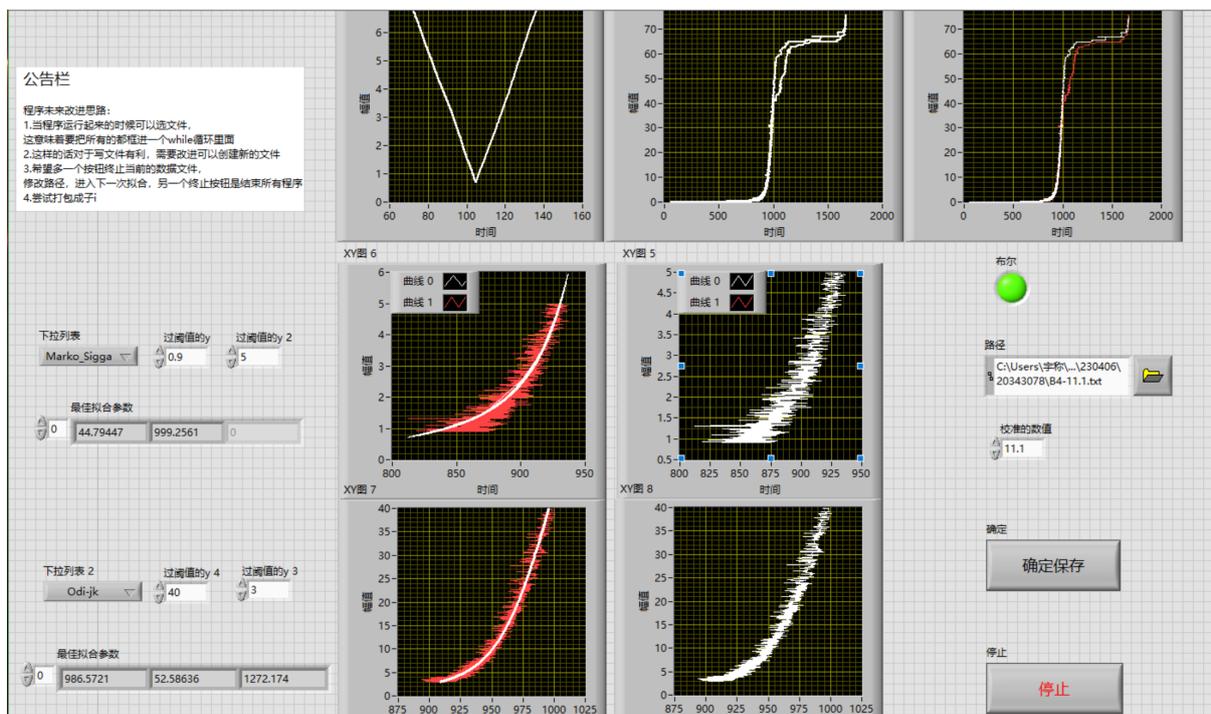


图 3 Labview 前面板

件按钮的亮灯提醒) 中包含了 case 结构。case 结构“事件超时”置为“-1”，保证程序始终运行；case 结构编辑项为 1 由事件“结束”控件触发，从而终止程序；case 结构编辑项为 2 则由事件“开始”控件触发，进入文件保存模块，同时为布尔灯输入一个 1 的布尔变量，使得布尔灯点亮，但是你会发现当你按下“开始”控件时的瞬间，布尔灯并不会立马点亮，谜底在保存控件按钮的亮灯提醒。

3. 程序框图排线整齐美观

- 如图6所示，排线布局的讲究详见Labview 编程感想部分

4. 保存控件按钮的亮灯提醒

设计的初衷是因为 Labview 的前面板仿真了我们实际使用的仪器，但是与实际

仪器不同之处在于没有触觉的反馈，这会导致我们常常怀疑自己是否按下了某个控件，为了解决这一问题，我想到可以通过亮灯的方式提供视觉反馈告诉用户是否按下了按钮。

想法令人激动，但是实现起来困难重重，Labview 和 C 语言类似，是依靠数据流决定程序的走向，不像 python 等描述性编程语言，只需要 if 等判断语句就可以决定不同程序部分运行的优先级，Labview 在决定程序运行顺序时要依靠 flat sequence 结构，但是也依赖于触发，依赖于数据流的“一个顶一个”状态的变化。

具体举例来说，我们回到上面的问题，当你按下“开始”控件时的瞬间，布尔灯并不会立马点亮，就算你发现和布尔灯相连之前还有一个“与”节点，但是反馈节点的默认是“F”通过“非”变成“T”，

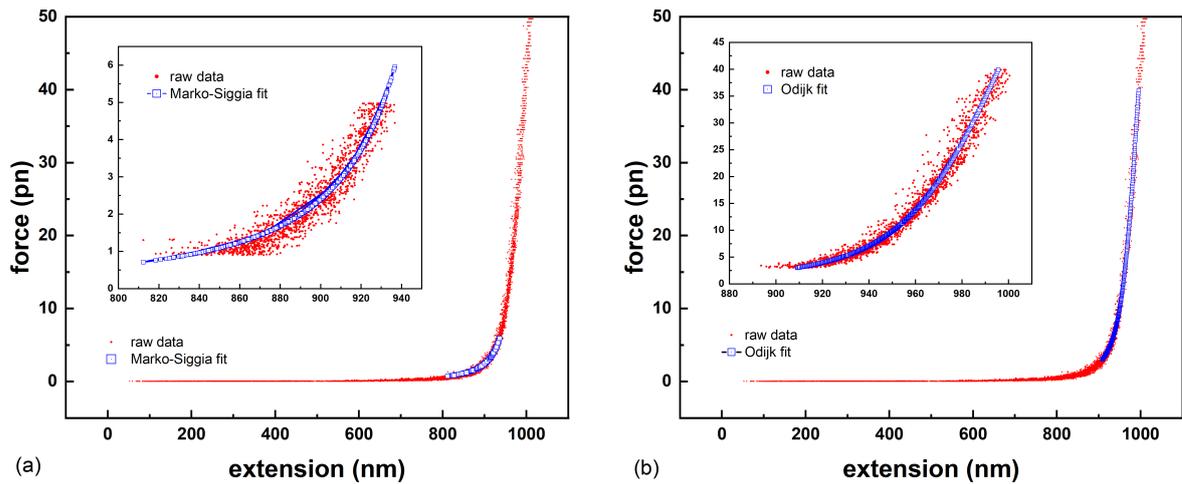


图 4 两种模型的拟合曲线

此时布尔灯前面的逻辑变量毫无疑问是“T”，但是它没有亮，原因就是：当你点击开始按钮时使得布尔灯前面的逻辑变量变成了“T”，但是一定要注意，这只是为布尔灯准备了一个“T”，没有触发，这个“T”就不会进入布尔灯，就没有办法影响布尔灯的状态，如果读者心生质疑，可以拿指针测试测试，或者打开调试模式，观察观察 Labview 世界中的“时间流逝与事件驱动”。那么，“T”什么时候才会进入布尔灯呢？必须要一个新的变量进入反馈节点，把反馈节点的默认“F”“顶”出来，从而和由于“开始”控件触发的“T”合并，从而触发布尔灯，换句话说，当文件保存完毕后，必须沿着 flat sequence 结构，流到布尔灯，但是由于反馈节点还没激发，所以这是布尔灯前面的语句失效，布尔灯的状态没有改变，接下来继续沿着 flat sequence 结构，流入等待 1000ms 控件的 sequence 帧，流入“T”的 sequence 帧，这时才把反馈节点的默认变量激发

出来，从而使得布尔灯点亮

当然，这里还有一个小细节，我的“开始”控件和“结束”控件都设置为“保持转换直到释放”，换成人话就是“提供两次对于 case 结构的触发，但是只提供一个“1”的布尔值。

这里为了大家熟悉这样的规则，给各位读者一个思考题，用上述的规则推导灯会亮持续 1s，之后被灭掉，同时结束程序。同时猜想这也是为什么老师会让我们保存程序时“将当前值设置成默认值”。

2.3 Labview 编程感想

1. 接触到了一种不同于 python 等描述性编程的程序运行逻辑。
2. Labview 提供了图形编程，使得编程的体验感从一维提升到二维，体验到了程序的“宽度”，但同时带来了连线上的烦恼和 debug 的困难。
3. 以下提供个人的排线布局习惯：

- (a) 从左往右是程序向前运行的时序逻辑，而从上下是并列逻辑。
- (b) 对于调用次数频率较高的变量，从上往下拉一条主线。
- (c) 永远不要出现“X”形连线，当遇到数组的 X,Y 交互的时候可以采取如图6中条件结构处“拐一个墙角”的替代方案。
- (d) 程序完成以后，要有一个整理美观的环节，最好先备份一份。在整理过程中先整理左右的宽度，再整理上下的高度，最理想的是一整根线变成一个整体没有太多打弯的地方。
- (e) 在使用结构类型时，要注意隧道的连线，选中隧道上下移动，或者双击以确认其连线。

4. Labview 中存在一个博弈，排线简介美观和连线清晰，思路条例，流程明朗之间的博弈，要谨慎使用排线重叠等美化技巧

2.4 未来改进方向

- 1. 通过提取文件名中校准力的信息，自动填充到校准力方块。
- 2. 设置一些对于拉伸曲线的判断标准，如相变平台的范围，拟合参数的合理范围，自动检测磁镊实验结果的有效性。

如果实现了以上两步，本次实验的处理数据过程将实现完全自动化，从而使得我们可以去探索真正中心极限条件下，也就是实验数据样本量足够大条件下，拟合参数的分布情况。

- 3. 当程序运行起来的时候可以选文件，然后运行拟合，在一次程序运行中，完成多次的拟合以及读写文件这意味着要把所有的都框进一个 while 循环里面。
- 4. 设计一个按钮终止当前的数据文件，修改路径，进入下一次拟合，另一个终止按钮是结束所有程序。
- 5. 尝试打包成子 vi。

3 结果分析

我们将 40 多组合理的数据得到的最优拟合参数统计分析得到如图5, 对于 Lo 和 Lp 两个参数我们直观的发现 Marko-Siggia 模型拟合得到的标准差总是小于 Odijk 模型，而对于 K0 参数的统计则十分分散，怀疑有可能是 Marko-Siggia 模型拟合的数据范围很小，所以参数的标准差比较小。

由于我们只有 40 几组的合理数据，不满足中心极限定理，故在统计参数的分布时使用了 Gamma 分布，然后通过如下方程计算得到均值和标准差 Gamma 分布的概率密度函数表示式如下

$$f(x; \alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\beta x}, \quad x > 0$$

其中， α 和 β 为分布的参数， x 为随机变量。 $\Gamma(\alpha)$ 表示 Gamma 函数，定义为：

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-t} dt$$

Gamma 分布的均值和方差可以使用如下方程计算：

$$E[X] = \frac{\alpha}{\beta}$$

$$\text{Var}[X] = \frac{\alpha}{\beta^2}$$

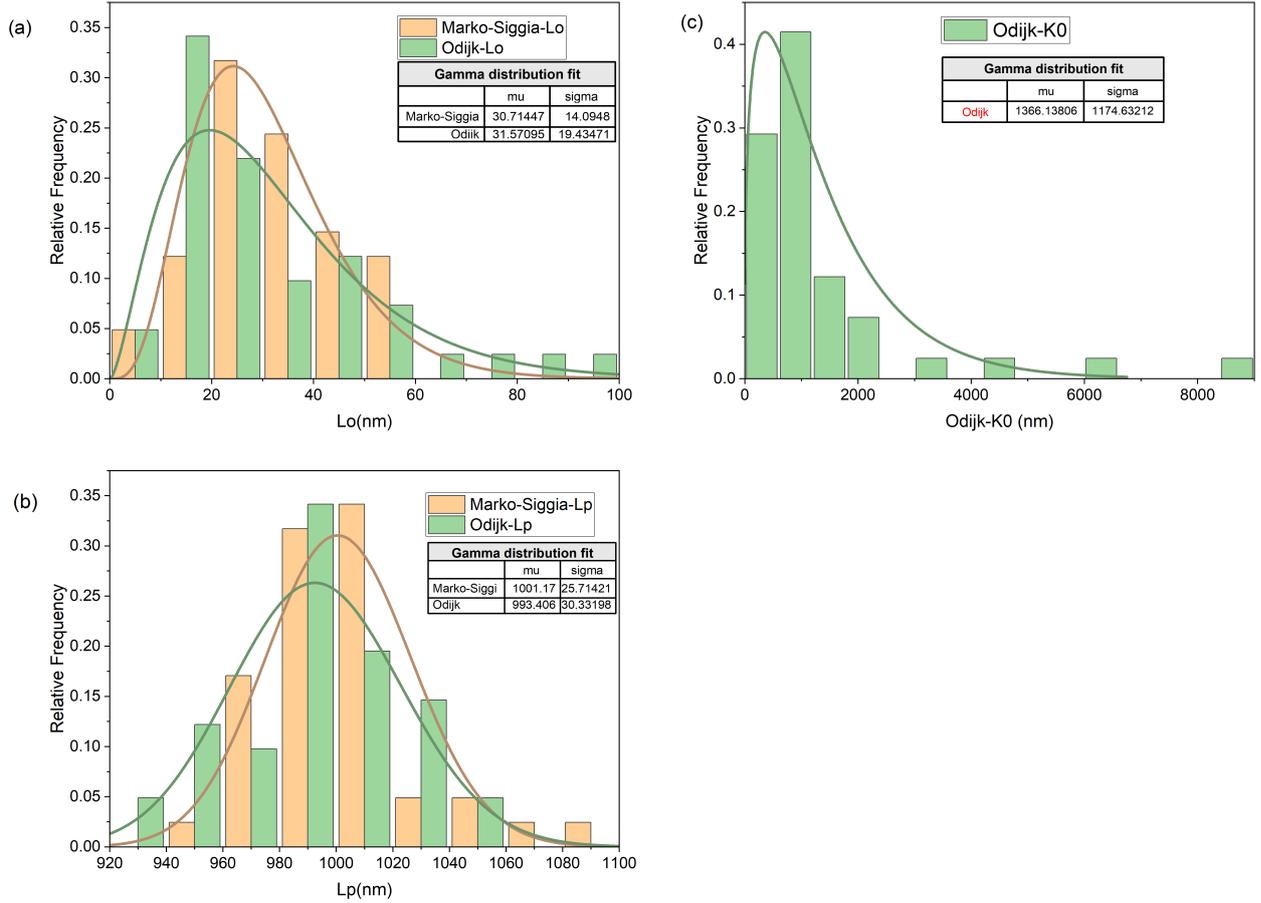


图 5 参数分布讨论

Exploring Labview Programming Based on Soft Matter Experiment Module

Wang Yu-Chen[†]

School of physics, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China

Abstract

In this study, we completed theoretical modeling, biological sample preparation and characterization, magnetic tweezers stretching experiments, discovered the hysteresis phenomenon during the stretching phase transition, and used Labview for data processing and analysis. Finally, through the analysis and statistics of all experimental data partners, we obtained the statistical distribution law of fitting parameters for two different DNA mechanical models. Through the training in

this experimental section, we understood the basic process of soft matter experiments and deeply felt the specific manifestation of theoretical concepts such as entropy competition and entropy elasticity. In this experiment, I was fascinated by writing efficient, beautiful, and user-friendly Labview programs, and recorded my program flowcharts, design highlights, and programming experiences to share with everyone.

Keywords: Labview, magnetic tweezers, PCR, and gel electrophoresis

* Project supported by the Physics Major Experiments Course of Sun Yat-sen University.

参考文献

- [1] Lipfert J, Hao X, Dekker N H, *Biophysical Journal* **96**(2009) 12 pp. 5040–5049.
- [2] Neuman K C, Lionnet T, Allemand J F, *Annual Review of Materials Research* **37**(2007) 1 pp. 33–67.
- [3] Vilfan A, Prevoršek S, Tomsic N, Kavcic B, Osterman N, Zupančič G, 2009. In *Handbook of Single-Molecule Biophysics* (Springer). pp. 371–395.
- [4] Chen H, Meisburger S P, Pabit S A, Sutton J L, Webb W W, Pollack L, *Biophysical Journal* **100**(2011) 2 pp. 517–523.
- [5] Wang M D, Yin H, Landick R, Gelles J, Block S M, *Biophysical Journal* **72**(1997) 3 pp. 1335–1346.

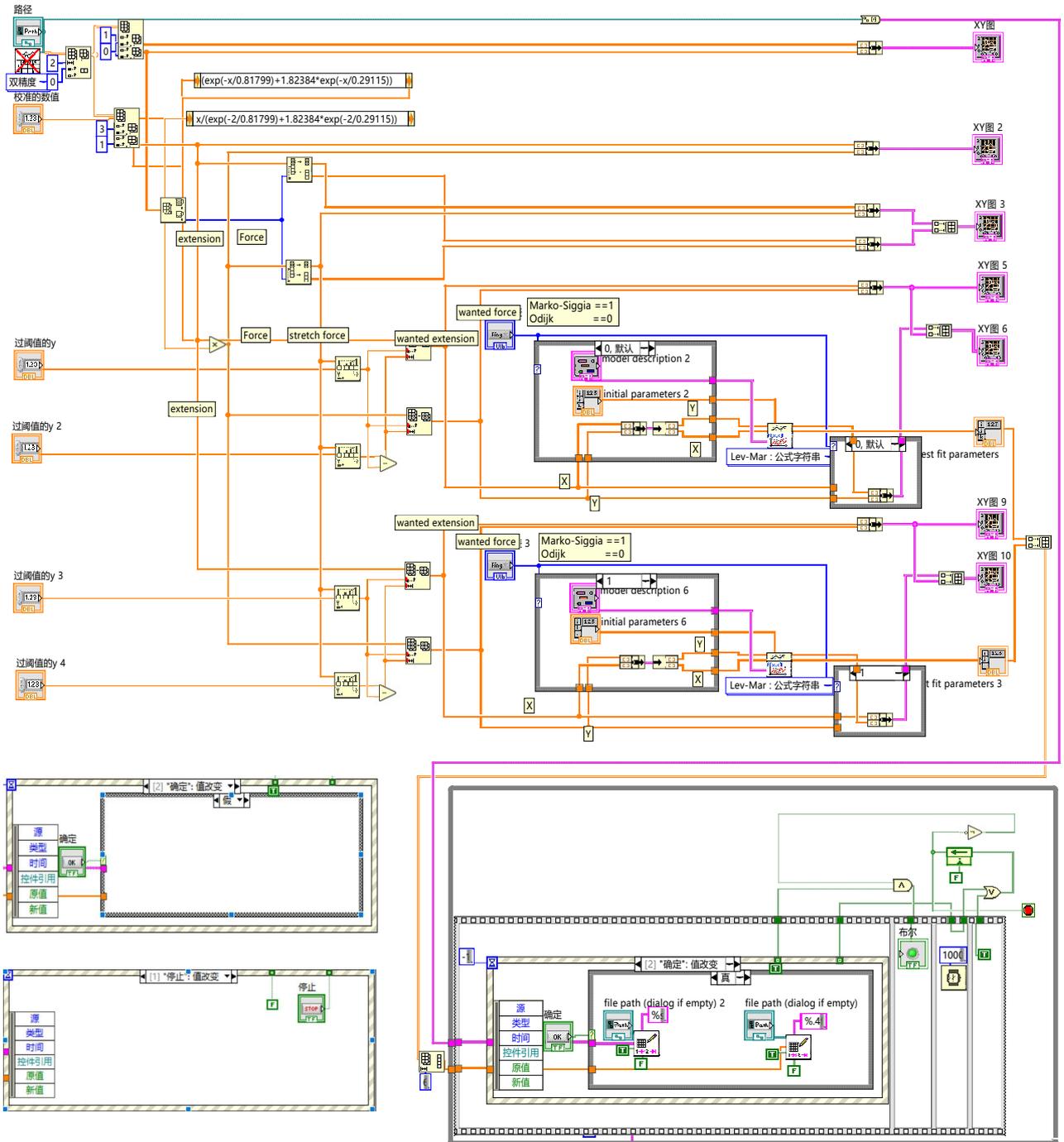


图 6 Labview 程序框图