

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УПАКОВКИ БЕЛКОВ

Зафиров Е.А., Мелких А.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина,
Российская федерация, 620002, Екатеринбург, ул. Мира 21, 8(343)375-94-97,
infinityziff@gmail.com; 8(343)375-93-49, melkikh2008@rambler.ru

Несмотря на большое число публикаций, проблема упаковки белков – парадокс Левинталя – до сих пор не решена (см., например, [1]). Проблема состоит в том, что упаковка белков должна занимать экспоненциально большое время, однако экспериментальное время составляет доли секунды.

В данной работе, для численного моделирования процесса упаковки двухкомпонентных молекул, на платформе Microsoft .NET Framework 3.5 в среде Microsoft Visual C# 2010 Express Edition на языке C# разработана новая программная среда, получившая название «Cubes3D». Среда позволяет визуализировать процесс упаковки в трёхмерном пространстве. Разработана реализованная в «Cubes3D» методика упаковки (прихода к нативной конформации) двухкомпонентной (состоящей из двух различных видов мономеров) трёхмерной системы.

В результате проведения, при помощи «Cubes3D» с варьированием входных параметров, более 45 000 экспериментов были определены:

- оптимальные (в смысле наискорейшего достижения конечных нативных конформаций), значения вероятностей взаимодействия мономеров (связанные с энергиями их взаимодействия), и вероятности прихода к конечным нативным конформациям при этих оптимальных значениях вероятностей;

- средние времена прихода рассмотренных начальных конфигураций к набору конечных нативных конформаций.

Одним из важных результатов моделирования является то, что даже оптимальный набор параметров взаимодействия между мономерами не позволяет достичь нативной конфигурации с вероятностью, превышающей 10%. Полученный результат означает, что парадокс Левинталя остается нерешенным.

Литература

1. A.V. Melkikh. Biological complexity, quantum coherent states and the problem of efficient transmission of information inside a cell // BioSystems 111 (2013). – P. 190–198.