

## ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КЛАСТЕРИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ АЛЬБУМИНА

Романов В.В., Тарасевич Ю.Ю., <sup>1</sup>Абатурова А.М., <sup>1</sup>Коваленко И.Б.

Астраханский государственный университет, Россия, 414056, ул. Татищева, 20 а, тел.:  
8(8512)610885, E-mail: tarasevich@aspu.ru

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Биологический  
факультет, кафедра биофизики, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ  
Тел. (495)9390289, e-mail: kovalenko78@mail.ru

В работе изучаются процессы агрегации молекул белка альбумина, происходящие при высыхании капли биологической жидкости. Задачей моделирования является выявление факторов (взаимодействий), определяющих кластеризацию молекул альбумина в растворе. В частности, представляет интерес выяснить, достаточно ли учета только электростатического взаимодействия, геометрической формы белков и броуновской диффузии (температурного фактора).

Для моделирования агрегации белка альбумина в трехмерном пространстве нами был применен метод прямого компьютерного моделирования взаимодействия белков [1]. В настоящем методе взаимодействующие молекулы представляются как твердые тела с определенным распределением зарядов на них. Движение молекул осуществляется под действием стохастической броуновской силы и электростатических сил взаимодействия между молекулами. На основании этого метода нами разработана компьютерная программа, позволяющая проводить моделирование процесса кластеризации альбумина в водном растворе и изучить условия, при которых происходит процесс кластеризации. Для написания программы был использован язык программирования C++, для визуализационного модуля – графическая библиотека OpenGL. Для моделирования стохастического броуновского движения использовался генератор псевдо-случайных чисел Л'Экюера с перетасовкой Бейса-Бурхэма. Результаты вычислений хранятся в базе данных. В программе для обработки столкновений используется библиотека компьютерного моделирования Open Dynamics Engine (ODE, <http://www.ode.org>), основными компонентами которой являются системы моделирования динамики твёрдого тела и обнаружения столкновений объектов.

### Литература

1. Kovalenko I. B., Abaturova A. M., Gromov P. A., Ustinin D. M., Grachev E. A., Riznichenko G. Yu., Rubin A. B. Direct simulation of interaction of plastocyanin and cytochrome f in solution // *Physical Biology*. 2006. V. 6. P. 121-129.