

# ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИЙ ГЛИЦИНА В ПОЛИПЕТИДНОЙ ЦЕПИ БЕЛКА МЕТОДОМ ПОСТРОЕНИЯ СЕТЕЙ

Савин Д.О.

Кафедра теоретической и математической физики, Уральский Федеральный университет, Куйбышева 48, Екатеринбург, 620002, Россия, 89326076527,  
[denis\\_savin92@mail.ru](mailto:denis_savin92@mail.ru)

Белки – регуляторы физиологических процессов, их свойства зависят от конформаций. Аминокислоты - "позвонки" конформаций белка. Чтобы лучше понять динамику конформаций белка необходимо понять, что статично, что подвижно на множестве подмножеств белка, одно из которых - глицин. Пусть каждому ЯМР-глицину поставлен в соответствие полный простой граф [1,2,3] с весами рёбер равными межатомным расстояниям между вершинами (сеть с евклидовой метрикой в качестве функции весов рёбер), тогда для структуры 2mc2.pdb RCSB [4] участка 12 - 217 mRyR2 можно получить наборы из 21-го веса, характеризующие конформации глицина. Мной выделены остатки глицина из файла со структурой ЯМР участка mRyR2, посчитаны для них веса графа-сети. Для весов по Т-критерию Стьюдента рассчитаны средние значения и доверительные интервалы с доверительной вероятностью 95% . Анализ интервалов показал: многие компоненты конформаций глицина с высокой точностью постоянны, иные значительно варьируются, в силу чего можно выделить инварианты движения глицина и компоненты-конформации. Средние значения и погрешности, что характеризуют разбросы значений компонент составили  $0.979166 \pm 1.96695e-006$ ,  $2.11529 \pm 7.03267e-006$ ,  $2.94086 \pm 0.0280611$ ,  $3.60831 \pm 0.46099$ ,  $2.60395 \pm 0.0654937$ ,  $2.70481 \pm 0.0822327$ ,  $1.44921 \pm 1.1558e-005$ ,  $2.4628 \pm 0.000128061$ ,  $3.22455 \pm 0.179417$ ,  $2.06841 \pm 6.55914e-006$ ,  $2.06849 \pm 7.30576e-006$ ,  $1.51478 \pm 1.45213e-005$ ,  $2.3876 \pm 3.07523e-005$ ,  $1.07979 \pm 3.3965e-007$ ,  $1.07984 \pm 5.0834e-007$ ,  $1.23088 \pm 1.17125e-006$ ,  $2.12597 \pm 1.12648e-005$ ,  $2.12556 \pm 8.44272e-006$ ,  $2.77738 \pm 0.0346298$ ,  $2.93385 \pm 0.0556492$ ,  $1.75736 \pm 1.33879e-006$  (А). Работа выполнена при поддержке проекта ППК-5-100-2020.

## Литература

1. Шапоров С.Д. Дискретная математика. Курс лекций и практических занятий. - СПб.: БХВ-Петербург, 2009. - 400 с.
2. Новиков Ф.А. Дискретная математика для программистов: Учебник для вузов. 3-е изд. - СПб.: Питер, 2009. - 384 с.
3. Оре О. Теория графов. - 2-е изд. - М.: Наука, Гл. ред. физ-мат. лит-ры, 1980. - 336 с.
4. Amador F.J. et al. Type 2 Ryanodine receptor doma... //J.Mol.Biol. **425**, 2013, 4034-4046.