

Научно-исследовательский семинар
механико-математического факультета
«Современные проблемы математики и механики»

Заседание 17 апреля (пятница) 2015 года, аудитория 1624, начало в 14.00.

**Знаменитая база данных пространственных
структур белков Protein Data Bank
глазами математика**

А.А. Тужилин

*Заведующий лабораторией компьютерной геометрии в
естественных и гуманитарных науках, профессор, д.ф.-м.н.*

Изучение пространственных структур белков – одна из важнейших задач современной молекулярной биологии. Связано это с тем, что ошибки в производстве белков, неизбежно возникающие в живых клетках, могут приводить к существенному изменению систем биохимических реакций и, как непосредственно наблюдаемое следствие, к болезням всего организма. Достижения геной инженерии позволяют исправлять положение на самом низком уровне (на уровне генов). Однако остается открытым следующий вопрос: можно ли по химическому составу белка, а именно, по последовательности составляющих его аминокислот, понять, какое пространственное положение займут эти аминокислоты? Ответ на этот вопрос позволил бы эффективно планировать генетические воздействия, что привело бы к существенному прогрессу в медицине.

Из-за огромной сложности белковых молекул, "честное" моделирование процесса сворачивания (конформации) белков не представляется возможным на данной стадии развития науки и компьютерной техники. Чрезвычайная важность этой проблемы приводит к необходимости привлечения к ее решению широкого круга специалистов из самых разных областей знания. В частности, для математиков имеется возможность статистического изучения уже полученных трехмерных структур белков на основе данных, собранных в Protein Data Bank. Естественно, от устройства этой базы, от удобства пользования ей, от качества выложенного там материала зависит прогресс как в теоретическом продвижении, так и в практическом применении, например, в изготовлении новых лекарств.

В докладе будет рассказано о первых впечатлениях авторов от знакомства с этой базой, а также о начальном шаге подготовки материала из базы для математической обработки. Уже на этих этапах выяснилось, что в базе имеются многочисленные ошибки, не отловленные до сих пор. Кроме того, было обнаружено, что некоторые устойчивые представления биологов, например, утверждение о том, что атомы пептидной группы CONH и два смежных с ней альфа-углерода лежат в одной плоскости, при этом альфа-углероды находятся в транс-конфигурации, оказывается неверным в достаточно большом числе случаев. Позитивным результатом является разработанная авторами методика выделения из базы ее части, которая представляется правдоподобной и пригодна для дальнейшего статистического исследования. Будет также сказано несколько слов об применении теории пространственных кривых для изучения конформации белков. Работа была выполнена совместно с Е.А. Вилкул (Тужилиной), А.О. Ивановым и А.С. Мищенко.