

Тридцатая международная конференция

МАТЕМАТИКА КОМПЬЮТЕР ОБРАЗОВАНИЕ

Симпозиум с международным участием

Биофизика сложных систем **Вычислительная и системная биология** **Молекулярное моделирование**

Под редакцией

Г.Ю. Ризниченко и А.Б. Рубина

Тезисы

Выпуск 30



Москва ♦ Ижевск

2023

ТРИДЦАТАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

МАТЕМАТИКА $\diamond$ КОМПЬЮТЕР $\diamond$ ОБРАЗОВАНИЕ

Пуццо, 23–27 января 2023 г.

XIV ОБЩЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ

БИОФИЗИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Организаторы Конференции:

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Пушкинский центр биологических исследований РАН, Институт биофизики клетки РАН, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ, г.Дубна), Государственный университет «Дубна», Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Национальный комитет российских биофизиков РАН, Межрегиональная общественная организация «Женщины в науке и образовании».

Международный Научный Комитет:

Н.В. Аммосова, Н.В. Белотелов, С.В. Беспалова, Е.В. Борисова, А.Р. Браже, А.Е. Варшавский, Н.А. Винокурова, Н.Д. Гернет, Т.П. Гончарова, Н.Г. Есипова, Р.Г. Ефремов, Г.Р. Иванецкий, В.И. Заляпин, В.Е. Карпов, И.Б. Коваленко, И.Б. Коваленко, В.М. Комаров, В.В. Кореньков, В.Д. Лахно, А.И. Лобанов, Е.И. Масвский, Г.Г. Малинецкий, В.А. Матвеев, Н.А. Митин, А.М. Нестеренко, Т.Ю. Плюснина, А.А. Полежаев, Д.Э. Постнов, О.Е. Пыркина, Ж.М. Раббот, Г.Ю. Ризниченко, А.Б. Рубин, М.Ю. Сидорова, П.Н. Сорокин, Е.А. Солодова, Т.А. Стриж, Ю.Ю. Тарасевич, Г.В. Трубиных, В.Г. Туманян, Л.А. Уварова, М.Н. Устинин, Д.В. Фурсаев, П.В. Фурсова, М.Г. Хренова, Е.Н. Черемисина, С.В. Чернышенко, А.И. Чуличков, А.К. Шайтан, А.В. Шаповалов, А.В. Шатров, Г.Н. Яковенко, Л.В. Якушевич, W. Ebeling, R. Pose.

Оргкомитет:

Галина Юрьевна Ризниченко – Председатель Оргкомитета МКО, профессор Московского государственного университета, председатель правления Межрегиональной общественной организации «Женщины в науке и образовании» (г. Москва);

Андрей Борисович Рубин – Председатель Оргкомитета Симпозиума «Биофизика сложных систем: вычислительная биология и молекулярное моделирование», академик РАН, профессор, зав. кафедрой биофизики биологического факультета Московского государственного университета (г. Москва);

Владислав Михайлович Комаров – Сопредседатель Оргкомитета МКО, Институт биофизики клетки РАН (г. Пуццо);
Ответственный секретарь – *Юлия Алексеевна Чистякова, Полина Викторовна Фурсова, Сергей Сергеевич Хрущёв*;
А.М. Абатурова, Е.П. Васюченко, Т.П. Гончарова, Е.В. Кочеткова, Л.Н. Краснопольская, И.Б. Коваленко, Ю.Д. Нечипуренко, Т.Ю. Плюснина, А.Д. Силаев, В.А. Федоров, Е.Г. Холина.

Адрес Оргкомитета: 119234, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 12, МГУ имени М.В.Ломоносова, Биологический ф-г, кафедра биофизики, тел.: (495) 939-02-89, факс: (495) 939-11-15,
E-mail: mce@mce.su, сайт: www.mce.su.

Секции

- S1. Математические теории
- S2. Вычислительные методы и математическое моделирование
- S3. Анализ сложных биологических систем. Эксперимент и модели
- S4. Социально-экономические исследования
- S5. Гуманитарное и естественно-научное образование
- S6. Музей в современном мире
- S7. Русский научный язык

ISBN 978-5-4344-1000-7

© Межрегиональная общественная организация «Женщины в Науке и Образовании», 2023

S3/W2

**Молекулярное
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

**Molecular
MODELING**

Руководители:

*Илья Борисович Коваленко, Владислав Михайлович Комаров,
Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин,
Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан.*

СРАВНЕНИЕ ФОТОАКТИВИРУЕМЫХ АДЕНИЛАТЦИКЛАЗ ИЗ BEGGIATOА И OSCILLATORIA ACUMINATA

Курышкина М.С., Кулакова А.М., Немухин А.В.

Московский Государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва
mariia.kuryshkina@chemistry.msu.ru

Циклический аденозинмонофосфат (сАМР) - аллостерический эффектор протеинкиназ. Протеинкиназы, фосфорилируют эффекторные белки, изменяя их активность. Таким образом, контроль концентрации сАМР позволяет осуществить настройку биологических процессов. Инструментом контроля концентрации может быть оптогенетическая система на основе фотоактивируемой аденилатциклазы (РАС), катализирующей реакцию превращения аденозинтрифосфата (АТФ) в сАМР. Особенно интересен РАС из *Beggiatoa* (bРАС) ввиду значительного повышения скорости ферментативной реакции при фотовозбуждении (в 300 раз), в то время как для других организмов, в частности для *Oscillatoria acuminata* (ОаРАС), скорость возрастает не более чем в 20 раз. Целью данной работы являлось сравнение ферментов bРАС и ОаРАС методами молекулярного моделирования.

В качестве основы для получения полноатомных моделей апо-форм ферментов bРАС и ОаРАС были выбраны структуры 5M2A и 4YUT из банка данных Protein Data Bank. bРАС и ОаРАС - гомодимеры, мономеры (А и В) которых состоят из фоторецепторного (BLUF) и каталитического (АС) доменов и перемычки. Для систем была проведена молекулярная динамика (МД) с использованием программного пакета NAMD. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле NPT ($p = 1$ атм, $T = 298$ К). Для белков использовалось силовое поле CHARMM36, для FMN – CGenFF, молекул воды – TIP3P. Шаг интегрирования составил 1 фс, продолжительность траекторий - 200 нс. Далее МД траектории были проанализированы с использованием динамического сетевого анализа. bРАС и ОаРАС, представимые в качестве связанных графов, были разбиты на восемь кластеров по алгоритму Гирвана-Ньюмана.

Для bРАС два кластера соответствуют BLUF доменам, четыре - АС доменам и два - перемычке. Для определения возможного пути аллостерической регуляции фермента при фотовозбуждении важно выявить аминокислотные остатки, являющиеся “связующими” между кластерами BLUF и АС доменов и перемычки. Так, для bРАС: LEU75 (А)-GLU124 (А), CYS76(А) - ASN136(А), TYR7(B) - LEU75(B) - “связующие” аминокислотные остатки между кластерами BLUF доменов и перемычки, ARG130(А)-GLU194(А), LYS125(А) - MET264(B), PRO128(А) - LYS263(B) - между кластерами перемычки и АС доменов. Для ОаРАС разбиение на кластеры отличается: два кластера соответствуют BLUF доменам, пять - АС доменам и один - перемычке. В качестве “связующих” аминокислот ОаРАС можно выделить следующие: SER78(А)-ILE134(А), LEU74(B) - GLU123(B) - между кластерами BLUF доменов и перемычек, GLU170(А)-ARG144(B) - между кластерами перемычек и АС доменов.

Стоит отметить большую “связность” bРАС, что может быть причиной более высокого повышения активности по сравнению с другими ферментами при фотовозбуждении.

Научное издание

Математика. Компьютер. Образование

Симпозиум с международным участием

Биофизика сложных систем

Вычислительная и системная биология

Молекулярное моделирование

Под редакцией

Г. Ю. Ризниченко и А. Б. Рубина

Тезисы

Выпуск 30

Подписано в печать 02.08.2023. Формат 60×84 ¹/₁₆.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 13,14. Уч.-изд. л. 13,42.

Гарнитура «Таймс». Бумага для цифровой печати. Заказ № 23-36.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»,

426061, г. Ижевск, ул. Ворошилова, д. 123.

E-mail: mail@icd.ru Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95

Отпечатано в цифровой типографии

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований».