

Расчет кривых малоуглового рассеяния на биологических молекулах и получение структурной информации о биологических комплексах по данным малоуглового рассеяния.

С.В Грудинин<sup>1,2,3</sup>, М.А. Гаркавенко<sup>4</sup>, А.М. Казеннов<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univ. Grenoble Alpes, LJK, F-38000 Grenoble, France

<sup>2</sup>CNRS, LJK, F-38000 Grenoble, France

<sup>3</sup>Inria

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Малоугловое рентгеновское рассеяние (Small Angle X-ray Scattering -SAXS) является одним из традиционных методов изучения биологических структур. В последние годы было разработано множество программных инструментов для обработки и интерпретации данных малоуглового рассеяния на биологических молекулах.

Первой задачей данной работой являлась разработка программного комплекса для расчета кривых малоуглового рассеяния по атомной структуре белка, записанной в формате PDB(Protein Data Bank). К настоящему моменту эта задача выполнена. Проведенные тесты показали, что разработанный нами программный комплекс Pepsi-SAXS (Polynomial Expansions of Protein Structures and Interactions) превосходит лучшие из существующих аналогов в среднем на 13% по точности и в 7.5 раз по скорости. Вторая задача – разработка программного инструмента для получения информации о взаимном расположении субъединиц биологического комплекса по кривой малоуглового рассеяния на комплекса. Данная задача находится на стадии активной разработки.

При разработке программного комплекса Pepsi-SAXS мы пользовались математическим методом описания малоуглового рассеяния с помощью сферических гармоник, разработанным Штурманом[2]. Этот же метод лежит в основе наиболее популярного из существующих программных комплексов Crysol[3]. Принципиальное отличие нашего программного комплекса от Crysol заключается в более качественном описании водной оболочки. Также в нашем программном комплексе порядок разложения по сферическим гармоникам является адаптивным и вычисляется с помощью теоремы Котельникова, в то время как у Crysol он всегда равен 15.

Для выполнения второй задачи планируется теоретически рассчитывать кривые рассеяния для различных взаимных расположений субъединиц и осуществлять поиск положения, соответствующего наилучшему совпадению теоретической и экспериментальной кривой. Быстрый расчет кривой комплекса производится с помощью соотношений, описанных Свергнуном[6][7].

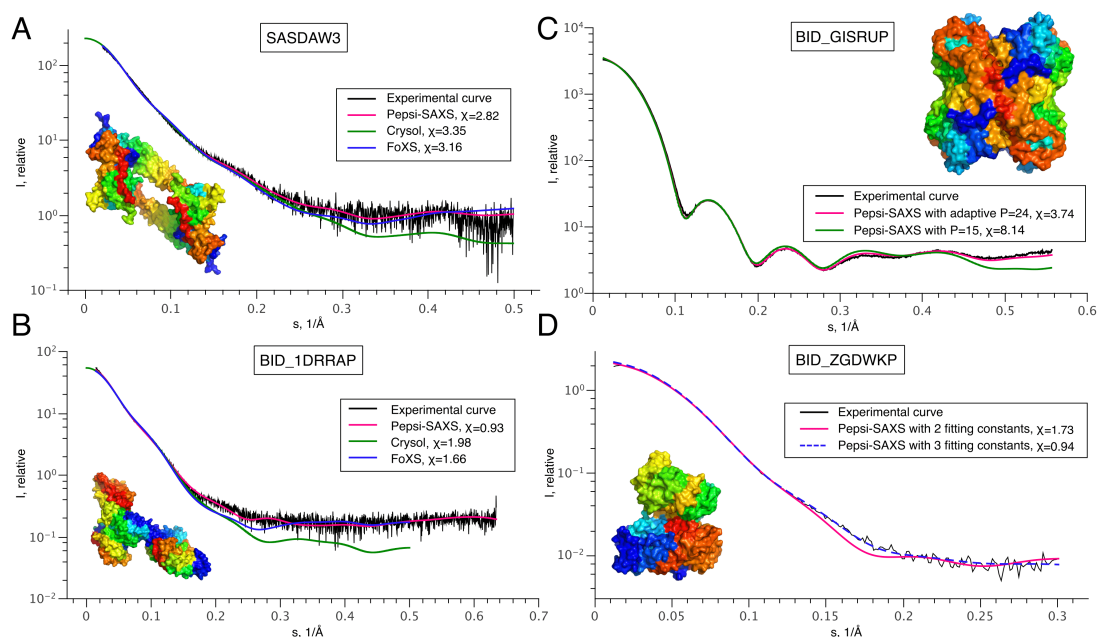


Рис. 1: Сравнение теоретически рассчитанных и экспериментальных кривых. А) Сравнение Pepsi-SAXS, Crysol, и FoXS на кривой DAW3 из базы данных SASBDB В) Сравнение Pepsi-SAXS, Crysol, и FoXS на кривой 1DRRAP из базы данных BioIsis. С) Эффект адаптивного порядка разложения на качество модели Pepsi-SAXS на примере кривой GISRUP из базы данных BioIsis. D) Сравнение теоретически рассчитанной Pepsi-SAXS кривой без profile offset константы подгонки и с ней.

## Литература

1. *Stuhrmann H. B.* Interpretation of small-angle scattering functions of dilute solutions and gases. A representation of the structures related to a one-particle scattering function //Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography. – 1970. – Т. 26. – №. 3. – С. 297-306..
2. *Svergun D., Barberato C., Koch M. H. J.* CRY SOL—a program to evaluate X-ray solution scattering of biological macromolecules from atomic coordinates //Journal of applied crystallography. – 1995. – Т. 28. – №. 6. – С. 768-773.
3. *Konarev P. V., Petoukhov M. V., Svergun D. I.* MASSHA—a graphics system for rigid-body modelling of macromolecular complexes against solution scattering data // Journal of Applied Crystallography. – 2001. – Т. 34. – №. 4. – С. 527-532.
4. *Svergun D. I.* Mathematical methods in small-angle scattering data analysis //Journal of Applied Crystallography. – 1991. – Т. 24. – №. 5. – С. 485-492.