

МОДУЛЬНАЯ ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ МНОГОУРОВНЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Абатурова А.М.¹, Алексеенко А.Е., Барсегов В.А.³, Жмуров А.А.³, Князева О.С.², Коваленко И.Б.¹, Морозов И.И., Ризниченко Г.Ю.¹, Рубин А.Б.¹, Трифонов С.В., Устинин Д.М.¹, Холодов Я.А., Хрущёв С.С.¹

Кафедра вычислительной математики, Московский физико-технический институт

¹МГУ имени М. В. Ломоносова, биологический факультет

²МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет

³Department of Chemistry, University of Massachusetts

Успехи квантовой химии дали надежду, что ответ на многие фундаментальные биологические вопросы может быть получен путём моделирования интересующих систем *ab initio*. Однако из-за значительной вычислительной сложности квантово-химических расчётов моделирование «из первых принципов» возможно на нынешнем этапе лишь для самых простых систем. В большинстве случаев приходится использовать те или иные эмпирические или полуэмпирические приближения, каждое из которых имеет свою область адекватности. Анализ поведения сложных биологических систем в широком временном и пространственном диапазоне требует применения различных подходов к моделированию, однако совместная интерпретация полученных результатов оказывается затруднительной.

В данной работе представлена модульная программная платформа для многоуровневого моделирования биомолекулярных систем, позволяющая объединить в одной модели несколько приближений с различной пространственно-временной детализацией. К настоящему времени создано ядро системы и модули, реализующие алгоритмы многочастичной броуновской динамики [1] и «крупнозернистой» (*coarse-grained*) самоорганизации биополимеров SOP [2]; ведётся работа над реализацией методов молекулярной динамики [3]. В текущей реализации платформы используется технология параллельных вычислений CUDA компании NVIDIA [4], что позволило увеличить скорость проведения расчётов до 90 раз по сравнению с последовательной версией. В качестве хост-платформы использовали AMD Opteron 2427 [5].

Для апробации модели исследовали реакцию взаимодействия белков пластоцианина и цитохрома *f* в растворе. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [6].

Литература

1. Kovalenko I. B., Abaturova A. M., Gromov P. A., Ustinin D. M., Grachev E. A., Riznichenko G. Y., Rubin A. B. Direct simulation of plastocyanin and cytochrome *f* interactions in solution // *Phys. Biol.* **3**, 2006, pp. 121–129.
2. Zhmurov A., Dima R. I., Kholodov Y., Barsegov V. Sop-GPU: Accelerating biomolecular simulations in the centisecond timescale using graphics processors // *Proteins* **78**, 2010, pp. 2984–2999.
3. Brooks B. R. et al. CHARMM: The biomolecular simulation program // *J. Comput. Chem.* **30**, 2009, pp. 1545–1614.
4. http://www.nvidia.com/object/cuda_home_new.html
5. <http://www.amd.com/ru/products/server/processors/>
6. Kaant A., Young S., Bendall D. S. The role of acidic residues of plastocyanin in its interaction with cytochrome *f* // *Biochim. Biophys. Acta* **1277**, 1996, pp. 115–126.