

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО НАБЛЮДАЕМЫХ СИГНАЛОВ В МНОГОЧАСТИЧНОЙ МОДЕЛИ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЫ

Устинин Д.М., Коваленко И.Б., Хрущев С.С.

Биологический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Россия, Москва, 119234, Россия,
Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, dmitry.ustinin@gmail.com

В настоящее время наличие подробных данных о структуре и функционировании субклеточных систем позволяет строить подробные компьютерные модели процессов, происходящих в живой клетке. Методы броуновской динамики удобно использовать для моделирования систем, включающих десятки и сотни взаимодействующих белковых молекул, например, фотосинтетической мембраны.

Разработанная нами ранее модель фотосинтетической мембраны [1] описывает перенос заряда в трехмерной области сложной геометрии, описывающей саму мембрану, прилегающую внешнюю область (строму) и межмембранное пространство (люмен). Движение мобильных белков-переносчиков электрона описывается с помощью метода броуновской динамики.

Однако, для сравнения результатов модели с экспериментом и калибровки параметров необходимо уметь моделировать экспериментально наблюдаемые сигналы, используемые при изучении фотосинтетических систем. Основными из них являются флуоресценция и сигналы электронного парамагнитного резонанса с различных участков фотосинтетической цепи переноса заряда, например, хлорофилла P700 и P680. Для моделирования этих сигналов необходимо моделировать процессы переноса внутри пигмент-белковых комплексов фотосистем 1 и 2, а также цитохромного комплекса.

В настоящей работе описан способ моделирования этих процессов через вектор состояний внутренних переносчиков для каждого комплекса, и матрицу переходов между этими состояниями. Такой способ позволяет описать изменение состояния комплексов за один временной шаг модели броуновской динамики, не прибегая к подробному моделированию внутренних процессов со значительно более мелким временным шагом. В результате достигается достаточная для наших целей подробность моделирования без заметных потерь в скорости вычислений.

Работа поддержана грантом РФФИ 15-07-08927.

Литература.

1. Сопряжение различных методов компьютерного моделирования в комплексной модели фотосинтетической мембраны / Д. Устинин, И. Коваленко, Г. Ризниченко, А. Рубин // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т. 5, № 1. — С. 65–81.