

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІНФОРМАТИКА, МАТЕМАТИКА,
АВТОМАТИКА

ІМА :: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

Моделирование взаимодействия белков актина и миозина

Святный В.А.¹, профессор; Гуськова Н.Г.^{1,2}, аспирант

¹ Донецкий национальный технический университет, г. Красноармейск

² Институт Макса Планка динамики сложных технических систем,
г. Магдебург, Германия

Данная работа посвящена исследованию взаимодействия белков актина и миозина в процессе сокращения клетки. Основной целью является построение математической модели взаимодействия и изучение зависимостей между концентрацией АТФ (аденозинтрифосфорной кислоты) и силой напряжения, которая возникает в моменты сжатия клетки. Актин – главный компонент тонких нитей. На протяжении всего цикла молекулы миозина движутся по поверхности актина. Миозин – одна из разновидностей белка, содержащегося в клетках и принимающего участие в сокращении мышц. Перемещение молекул миозина происходит за счет гидролиза АТФ.

Основываясь на базовой модели [1] в работе рассмотрен биохимический цикл взаимодействия описанных белков. При моделировании были внесены существенные изменения в диапазоны изменения параметров [2] и учтена вероятность разрыва нитей актина под воздействием общей силы.

Для моделирования использовалась математическая среда PROMOT (Process Modeling Tool), которая представляет собой инструмент объектно-ориентированного моделирования химических, биохимических и внутриклеточных процессов.

В результате моделирования было показано, что взаимодействие между молекулами миозина и нитями актина возникает только в том случае, когда содержание АТФ в клетках находится в интервале от 0.1 до 10 единиц. В тех случаях, когда концентрация слишком велика или мала, не происходит гидролиза АТФ, что влечет за собой отсутствие реакции.

1. O. Lewis, R. Guy, J. Allard, *J. Biophys.* **107**, 863 (2014)
2. U. George, A. Stephanou, A. Madzvamuse, *J. Math. Biol.* **66**, 547 (2013)