

УЧЁТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КРУПНОЗЕРНИСТОЙ МОДЕЛИ БЕЛКОВ

Алексеев А.Е., Кононова О.Г.¹, Холодов Я.А., Барсегов В.А.¹

Московский физико-технический институт, Москва

¹University of Massachusetts, Lowell, MA, USA

Вычислительные (*is silico*) эксперименты являются одним из важнейших инструментов для исследования микроскопических свойств различных макроскопических процессов в биомолекулах, таких как механическая деформация в АСМ-экспериментах. Однако вычислительная сложность даже крупнозернистых молекулярно-динамических симуляций зачастую неприемлемо высока из-за большой разницы в характеристических временах *in vitro* и *in silico* экспериментов.

Модель самоорганизующегося полимера (Self Organized Polymer, SOP) — основанная на нативной топологии крупнозернистое поле сил для биомолекул. Программный пакет SOP-GPU за счёт использования графических процессоров (ГП) делает возможным изучение динамики биофизических систем, содержащих до 10^5 аминокислотных остатков, на экспериментально-значимых временных шкалах. В данном докладе мы представим расширенную модель SOP, включающую гидродинамические взаимодействия и полностью реализованную на ГП, в которой многочастичные эффекты, вызванные механическим взаимодействием с растворителем, учтены с использованием тензора Ротне-Прагера-Ямакавы (Rotne-Prager-Yamakawa).

Мы исследовали возможности модели, проводя симуляции механического разворачивания и индентации различных биологических систем, начиная с небольших белков (WW-домен; $N \approx 10^1$ аминокислот) и заканчивая крупными белковыми ассамблеями (вирусные капсиды ССМV и НК97; $N \approx 10^4 - 10^5$). Мы показали, что несмотря на дополнительные вычислительные затраты, связанные с учётом гидродинамических взаимодействий, итоговое время вычислений может быть уменьшено за счёт ускорения кинетики механических процессов, при сохранении большинства микроскопических деталей.