

МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ АКТИВНОГО ЦЕНТРА ФЕРМЕНТАТИВНЫХ СИСТЕМ

Романова Е.Ю., Уварова Л.А.¹

ФГБОУ ВО Тверская сельскохозяйственная академия, Тверь, Россия
¹ФГБОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН», Москва, Россия,
170904, Тверская область, г. Тверь, ул. Маршала Василевского (Сахарово), д. 7
¹127055, Вадковский пер., д. 3А
E-mail: kati-v@yandex.ru

Такие сложные, самоорганизующиеся, открытые биомикросистемы как ферменты характеризуются высокой специфичностью относительно природы субстратов, взаимодействующих с активными центрами. Ферменты различаются последовательностями аминокислотных остатков, структурой активных центров, пространственной конфигурацией. Теория ферментативного катализа и экспериментальные исследования выявили общую схему ферментативных каталитических реакций, протекающих в четыре стадии: 1) субстраты взаимодействуют с активными центрами ферментов, образуя неустойчивые фермент-субстратные комплексы, что сопровождается выделением свободной энергии; 2) активизация комплексов с последующими химическими изменениями субстратов; 3) распадом комплексов отделением конечных продуктов реакций от активных центров; 4) возвращение активных центров в исходные состояния. Активные центры с ближайшим белковым окружением при взаимодействиях с субстратами претерпевают конформационные изменения: перемещения групп атомов или отдельных атомов, изменения длин связей, повороты групп атомов вокруг связей.

Сохранение структуры активных центров и их переходы из одного конформационного состояния в другое обеспечивается белковым матриксом, в который они погружены. Тогда модель функционирования фермента можно представить как марковский процесс с дискретными состояниями, т.е. когда вероятность любого состояния в будущем для любого момента времени зависит только от состояния системы в настоящем, причём, нет зависимости от пути перехода из одного состояния в другое. Для математического описания процесса составляется граф состояний. Событие, состоящее в том, что после каждого шага система находится в состоянии S_i , можно считать случайным. Исходное состояние S_0 активного центра принимается заданным, тогда последовательность случайных событий - состояний S_1, S_2, S_3, S_4 представляют цепь Маркова. Вероятности состояний P_i - это вероятности того, что после каждого шага система будет находиться в состоянии S_i . Далее составляется матрица переходных состояний, в которой строка характеризует вероятность перехода системы из состояния, а столбец - в состояние. Переходы представляют полную группу несовместных событий. Если известно начальное распределение вероятностей, то имеются возможности составить матрицу переходных вероятностей и можно по рекуррентной формуле рассчитать вероятности состояний системы P_i . Представленная модель использовалась для анализа состояний на различных этапах функционирования некоторых ферментов на основе полученных значений вероятностей.