

Виртуальный эксперимент и его верификация в энзимологии

Аннотация

В предлагаемом курсе рассматриваются методы компьютерного анализа структуры белков, которые могут быть использованы для анализа строения активных (каталитических) и регуляторных (аллостерических) центров в молекулах ферментов. Излагаются базовые квантово-химические положения, лежащие в основе рассматриваемых методов, и приводится информация о пакетах вычислительных программ, применяемых в этих методах. Рассматриваются методы «докинга» и соответствующие компьютерные программы, позволяющие определять погружение-взаимодействие конформационно подвижных лигандов и белков. Эти подходы эффективны в анализе взаимодействия субстратов ферментативных реакций и регуляторных лигандов с соответствующими центрами связывания. Рассмотрены методы компьютерного анализа моделей ферментативной кинетики и получения надежных оценок кинетических параметров с использованием адекватных методов. Анализируются конкретные кинетические модели методом имитационного компьютерного моделирования («машинный эксперимент») с целью получения дополнительной информации о свойствах изучаемой системы и проверки правильности выбора методов обработки результатов, демонстрируются преимущества анализа моделей ферментативной кинетики с помощью бутстреп-выборок, а также положительные аспекты медианных методов оценивания для различных моделей. Дается сравнительная оценка разных методов компьютерного анализа моделей ферментативной кинетики.

Наполняемость группы: 2-25 человек

Разработчик: Стефанов В.Е., к.б.н., доцент кафедры Биохимии, заведующий кафедрой Биохимии