**Выявление детерминант функциональных групп белков**

***Багрова О.Е.***

*аспирантка*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: o-bagrova@mail.ru*

Прогнозирование функции белков на основе их структуры приобретает всё большую важность в связи с ростом числа известных структур, превышающим возможности полноценного исследования их функций. Современные подходы к предсказанию функции белков в большинстве своём основаны на поиске аналогичных белков с уже известными функциями. Однако для белков, существенно отличающихся от известных структур или имеющих лишь удаленное сходство с белками без функциональной аннотации, эти методы оказываются недостаточно эффективными. Среди широко применяемых методов прогнозирования функции белков можно выделить методы, основанные на анализе последовательности или структуры белка с учетом эволюционных связей, функциональной геномики и машинного обучения. Однако следует отметить, что несмотря на то, что эти методы способны предоставить ценную информацию, прогнозирование функции белка остается сложной задачей. Более того, наравне с предсказанием функции, важной задачей является исследование фундаментальных биофизических характеристик, определяющих свойства и функцию биомолекулы.

Целью данной работы является выявление биофизических детерминант, способных позволить разделение белков на группы по их функциональным особенностям. В предыдущей работе исследованиях был разработан метод выделения структурных особенностей полипептидных групп, что привело к выявлению некоторых закономерностей между белками с различными функциями [1]. Настоящее исследование призвано продолжить данную тематику, углубившись в первую очередь в классификацию ферментов. Для этих целей был проведён анализ широкой выборки белков из базы данных структур белков PDB [2], учитывающий особенности первичной и вторичной структур, включая состав аминокислотных остатков и распределение вторичных структур.

Полученные результаты представляют собой не только интерес для фундаментальной науки, но и имеют потенциал для использования более совершенных алгоритмов, предсказывающих функцию белков.

Багрова О.Е. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (№ 23-2-10-24-1).

**Литература**

1. Малышко Е.В., Багрова О.Е., Твердислов В.А. Cвязь хиральных иерархических структур белков с их функциями // Биофизика, 2020, том 65, вып. 3. c. 439–444.
2. <http://www.rcsb.org> (The Protein Data Bank).