



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Пятница, 14 октября 2011 г., в 11.00
Ком. 407

**О.А. Афанасьев¹, П.В. Зрелов¹, В.В. Иванов¹, Р.В. Полозов²,
В.С. Сивожелезов³, В.А. Степаненко¹, Ю.Н. Чиргадзе⁴**

1 Лаборатория информационных технологий,

2 Институт теоретической и экспериментальной физики РАН, *Пушино*,

3 Институт биофизики клетки РАН, *Пушино*,

4 Институт белка РАН, *Пушино*.

Комплекс программ для картографирования и исследования белков и нуклеиновых кислот

Разработан комплекс программ с удобным графическим интерфейсом для картографирования и исследования в среде ОС Windows поверхности глобулярных белков, спиральных цепочек белков, ДНК, РНК на основе PDB-файлов. Для белков возможно получение карт с функциональной раскраской атомов и рельефа в проекции Аитова-Хаммера (программа SURFACE-2008) или в оригинальной цилиндрической проекции (программа PROT-Z). Программа helix-DNA обеспечивает получение карт поверхности спиральных молекул ДНК/РНК в виде ортогональной проекции трехмерной структуры на плоскость, перпендикулярную длинной оси спирали ДНК. В пакет программ комплекса включена модификация программы SURFACE, разработанная ранее в среде OS DOS для картографии поверхности глобулярных белков в проекции Аитова-Хаммера. В состав комплекса входят компактные версии вышеназванных программ: программы SURFACE-compact, PROT-Zcompact и helix-DNA-Zcompact. Из этих программ удален графический интерфейс, т.к. они предназначены для организации массового счета карт в распределенной вычислительной среде. Этим достигается существенная экономия как вычислительных ресурсов, так и времени счета при исследовании однотипных структур данных. Для получения графических изображений карт необходимо использовать полные версии соответствующих программ. Управление заданиями в среде распределенных вычислений осуществляется с помощью специальной программы-монитора NetdBBio, работающей под ОС Windows.