

## 3D ФУРЬЕ-АНАЛИЗ В СФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

**Батяновский А.В.<sup>1</sup>, Есипова Н.Г.<sup>2</sup>, Туманян В.Г.<sup>2</sup>, Волоотовский И.Д.<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт биофизики и клеточной инженерии НАН Беларуси, Минск, Беларусь, <sup>2</sup>Институт молекулярной биологии им. Энгельгарта РАН, Москва, Россия*

На сегодняшний день существует существенный интерес к подходам по представлению молекулярных систем биологической природы в виде объектов интегральных преобразований. В частности, для сравнительного анализа поверхностей [1] и компьютерного выявления докинга [2] в ряде работ и инструментов, в том числе и весьма успешных, используется разложение по каким-либо достаточно произвольным выбранным комбинациям специальных функций, отвечающих за различные координаты. Наиболее интересны варианты с использованием сферических систем координат, поскольку это даёт возможность производить быстрые преобразования разложений соответствующие вращению исходных объектов, хотя в таких случаях возникает задача по выявлению преобразований разложения, соответствующих параллельному переносу исходных объектов в пространстве.

Нами на основании двойного интеграла Гегенбауэра типа Пуассона [3] предложен подход для получения Фурье-образов в сферических системах координат при представлении угловых компонент исходных объектов в виде разложения по сферическим функциям. Показана возможность разложения по функциям Бесселя полуцелого и целого порядка. Развита метод их преобразований как при поворотах исходных объектов, так и согласно параллельным смещениям. Такие объекты допускают не только проведение сравнительного анализа поверхностей молекул, но благодаря теореме о свёртке открывают перспективы изучения возникающих между молекулярными объектами силовых взаимодействий. Предложена модификация метода для изучения не только поверхностей, но и структурного организации макромолекул.

### **Библиографические ссылки**

1. Mavridis L, Ritchie D.W / 3D-blast: 3D protein structure alignment, comparison, and classification using spherical polar Fourier correlations // Pac Symp Biocomput. 2010. P.281–92.
2. Padhorny D and etc. / Protein-protein docking by fast generalized Fourier transforms on 5D rotational manifolds // Proc Natl Acad Sci U S A. 2016. Vol. 113(30). P.4286–93.
3. Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций. Москва: «Издательство иностранной литературы». 1949. 799 с.