

# Уургийн Гурван Хэмжээст Бүтцийн Фрактал Хэмжээсийг Тодорхойлох

Б.Мижиддорж

Мэдээлэл компьютерийн ухааны тэнхим  
Монгол Улсын Их Сургууль  
Улаанбаатар, Монгол  
[mijiddorj@num.edu.mn](mailto:mijiddorj@num.edu.mn)

П.Энхбаяр

Мэдээлэл компьютерийн ухааны тэнхим  
Монгол Улсын Их Сургууль  
Улаанбаатар, Монгол  
[p.enkhbayar@num.edu.mn](mailto:p.enkhbayar@num.edu.mn)

**Товчлол** — Уургийг бүрдүүлэх полипептидын гинж нь Евклидийн геометрын хүрээнд тодорхойлогдохгүй нийлмэл бүтэцтэй байх ба үүнийг фракталын хэмжээсээр нь тодорхойлж болно. Фракталын хэмжээс нь орон зайн дүүргэлтийн хэмжээс юм. Бид энэ ажилдаа фрактал онолыг товч тайлбарлаж Ван нарын сайжруулалт хийсэн фрактал хэмжээс бодох алгоритмыг ашиглан код бичиж үр дүнг шалгав. Мөн фрактал дүрсийн сонгодог жишээний нэг Кохын муруйн 3 тохиолдолд фрактал хэмжээсийг тодорхойлон алгоритмд анализ хийв. Эдгээр үр дүн нь бидний бичсэн код зөв ажиллаж байгаа болохыг харуулж байна.

*Түлхүүр үг*—фрактал хэмжээс, уургийн гурван хэмжээст бүтэц, фрактал диаграмм.

## I. ОРШИЛ

Одоогоор 90 мянга гаруй уургийн гурван хэмжээст бүтэц тодорхойлогдоод байна [1]. Тэдгээр уургийн организмд гүйцэтгэх үүрэг нь бүтцээсээ ихээхэн хамаардаг учраас уургийн бүтцийн шинж чанарыг нарийн судлах болсон. Уургийн гурван хэмжээст бүтцийг геометр талаас авч үзвэл хэт эмх цэгцгүй ба Евклидийн болон дифференциал геометрийн аль аль нь бүрэн тайлбарлах боломжгүй. Иймээс сүүлийн жилүүдэд уураг болон полимерийн бүтцэд тоон анализын судалгаа олон хийгдсэн ба геометрийн шинэ хэрэгсэл болох фрактал онолыг уургийн бүтцийн судалгаанд хэрэглэх болсон [2, 3]. Фрактал онолыг анх Английн судлаач Бенойт Манделброт үндэслэн дараах байдлаар тодорхойлсон: “фрактал нь арзгар биет эсвэл өөртэйгөө төстэй жижиг хэсгүүдэд хуваагдсан геометрийн хэлбэр ба эдгээр жижиг хэсгүүд нь том хэсгийнхээ хэмжээг нь багасгасан хуулбар байдаг”. Латины ‘fractus’ буюу бутарсан зүй гэсэн утгатай үгнээс фрактал гэсэн үгнээс гаралтай. Фрактал хэмжээсийг тэнгэр дэх үүл, Британийн далайн эргийн шугамын хэлбэр дүрсийг тайлбарлахад ашигласан [4, 5]. Биеийн фрактал хэмжээс нь тэр биеийн орон зайн дүүргэлтийг илэрхийлдэг [6]. Хавлин болон Бен-Аврахам нарын 1982 оны ажлууд уургийн фрактал хэмжээсийг бодоогүй ч гэсэн 3 хэмжээст бүтцийн фрактал хэмжээсийг бодох аргыг

үндэслэсэн

[7-9]. Изагай болон Ито нар таван ялгаатай ангид багтах 43 уураг болон идеал Гауссын гинжийн фрактал хэмжээсийг нарийн тодорхойлсон [10]. Тэд дүгнэхдээ 10-аас олон амин хүчилтэй уураг Гауссын гинжийг бодвол нягт ихтэй учир фрактал хэмжээс ихтэй байна гэж үзсэн. Ван нарын судлаачид фрактал хэмжээс бодох арга дээр сайжруулалт хийн, дөрвөн ялгаатай ангид багтах 90 уургийн фрактал хэмжээсийг бодсон [11]. Уургийн фрактал хэмжээсийн дундаж утга нь Евклидийн гурван хэмжээст огторгуй дахь санамсаргүй алхмын фрактал хэмжээсийн онолын утгатай маш ойролцоо байна гэж дүгнэсэн. Даниел нарын судлаачид 4 ялгаатай ангийн 97 уургийн фрактал хэмжээсийг бодож уургийн фолдын эзлэхүүн (folding volume) болон шахагдалтын (уургийн ямар хэмжээгээр шахагдах боломжтой байгааг илэрхийлэх хэмжигдэхүүн) хамаарлыг шалгасан. Уургийн фрактал хэмжээс нь эзлэхүүн болон шахагдалтаас хамаарахгүй байгааг тодорхойлсон.

Бид дээрх судалгаанууд дээр үндэслэн Ван нарын судлаачдын ашигласан уургийн фрактал хэмжээсийг бодох алгоритмын дагуу MATLAB програм дээр код бичиж шалгав. Кодыг шалгахдаа Ван нар фрактал хэмжээсийг нь бодсон уургийн загвар дээр дахин бодов. Мөн Кохын муруйн 3 тохиолдолд фрактал хэмжээсийг бодож алгоритмыг шалгав.

## II. МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

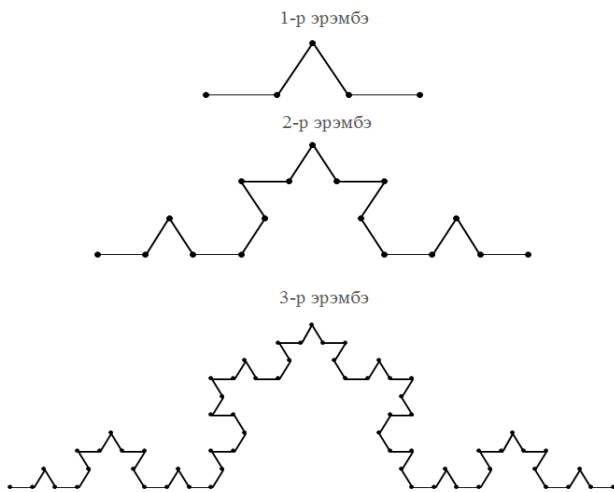
### A. Уургийн өгөгдөл

Ван нарын өгүүллэгт меохемеритин (Myohemerythrin, 2mhr), пластоцианин (Plastocyanin, 4pcy) болон субтлин (Subtlisin, 1sbt) уургийн фрактал диаграммыг үзүүлсэн учир эдгээр уургийн бүтцийг сонгон авч фрактал хэмжээсийг дахин бодож өөрсдийн кодыг шалгав. Уургийн бүтцийн файл нь PDB форматаар Уургийн Өгөгдлийн Банк ([Protein Data Bank](#)) [1] өгөгдлийн санд хадгалагддаг.

### B. Кохын муруй

Кохын муруйн жижиг хэсэг нь нийт том бүтцийнхээ жижиг хувилбар болдог ба фрактал дүрсийн ойлгомжтой жишээнүүдийн нэг юм. Бид

уургийн фрактал хэмжээс бодсон алгоритмыг ашиглан 1, 2 ба 3 -р эрэмбийн Кохын муруйн фрактал хэмжээсийг тодорхойлов. Зарим тохиолдолд шулуун шугам бол Кохын муруйн нэгдүгээр эрэмбэ гэж үзэх нь байдаг. Хэрэв ингэж үзвэл дараагийн гурван эрэмбийн зургийг **Зураг 1-т** үзүүлэв.



Зураг 1. 1, 2 болон 3-р эрэмбийн Кохын муруй. Хэрчим байсан гэж үзвэл түүний уртыг гурав хуваасны нэгтэй тэнцүү урттай хэсгийг адил урттай талаар хашигдсан өнцөг болгон өөрчилвөл 1-р эрэмбийн Кохын муруй үүснэ. Нэгдүгээр эрэмбийн муруйн тал бүрийг дахин гурав хувааж дунд талын хэрчмийг өнцөг болгон өөрчилвөл хоёрдугаар эрэмбийн муруй гарна. Энэ үйлдлийг дахин давтаж хийвэл 3-р эрэмбийн Кохын муруй үүсдэг.

### С. Фрактал хэмжээс бодох алгоритм

Бид энэ ажилд уургийн фрактал хэмжээсийг Ванг нарын судлаачдын [11] ашигласан алгоритмын дагуу өөрийн лабораторид MATLAB хэл дээр код бичиж фрактал хэмжээсийг бодсон. Фракталын онолоор уургийн молекулын үндсэн хэлхээний урт (L) нь шкал (j) гэж нэрлэгдэх уртыг хэмжих нэгжээр тодорхойлогдоно. Шкал нь нэгтэй тэнцүү (j=1) үед зэргэлдээ хоёр  $C_a$  атомуудыг холбосон хэрчмүүдийн уртын нийлбэрээр L бодогдоно. Энд N - 1 тооны урт бодогдоно. Шкалыг j = 2 болгоход i ба i+2 дугаар  $C_a$  атомуудыг холбосон хэрчмүүдийн уртын нийлбэрээр L бодогдоно. Шкал их болох тутам урт L багасдаг зүй тогтолтой. Уургийн молекулын фрактал хэмжээсийг дараах дэс дараалсан алхмуудаар бодно.

- N тооны амин хүчлээс тогтсон уургийн молекулын үндсэн хэлхээний уртыг олохын тулд зэргэлдээ 2 амин хүчлийн  $C_a$  атомуудын хоорондох зай ( $L_j$ )-уудыг бодно.

$$L_j(i, i + j) = \left| \vec{r}_{i+j}(x, y, z) - \vec{r}_i(x, y, z) \right| \quad (1)$$

Энд j = 1, 2, 3, ..., N - 1

- Уургийн нийт урт ( $L_j$ ) нь эдгээр зайнуудын нийлбэр  $L(j)$  болон төгсгөлдөө холбогдоогүй үлдсэн атомуудын тооноос хамаарсан засвар  $C_i$  - ийн нийлбэрээр тодорхойлогдоно.

$$L(j) = \sum_i L_j(i, i + j) \quad (2)$$

$$C_j = \frac{nL(j)}{m \cdot j} \quad (3)$$

Энд  $i+j < N$  байх ба n-холбогдоогүй үлдсэн амин хүчлийн тоо, m-холбосон хэрчмүүдийн тоо болно. Иймд уургийн молекулын урт

$$L_j = \sum L_j(i, i+j) + C_j \quad (4)$$

болно.

- Бодож олсон уртын логарифмыг босоо тэнхлэгт авч шкалын логарифмыг хэвтээ тэнхлэгт авч нэг цэг байгуулна ( $\lg(j)$ ,  $\lg(L_j)$ ).
- Шкалыг 2 болгож дээрх алхмуудыг давтах ба гарсан 2 цэгийн хувьд шугаман регрессээр налуу  $T_1$  тодорхойлогдоно.
- Шкалын 3, 4 гэх мэт N - 1 хүртэлх утгууд дээр дээрх алхмуудыг давтаж хийхэд N-2 ширхэг өнцгийн налуу  $T_k$  олдоно.
- Эндээс N-2 ширхэг дэд фрактал хэмжээс  $D_k = 1 - T_k$  гэж бодогдоно.
- Эдгээр дэд фрактал хэмжээсийн дунджаар уургийн гурван хэмжээст бүтцийн фракталын

$$D = \frac{1}{N-2} \cdot \sum_{k=1}^{N-2} D_k \quad (6)$$

хэмжээс гэж олдоно.

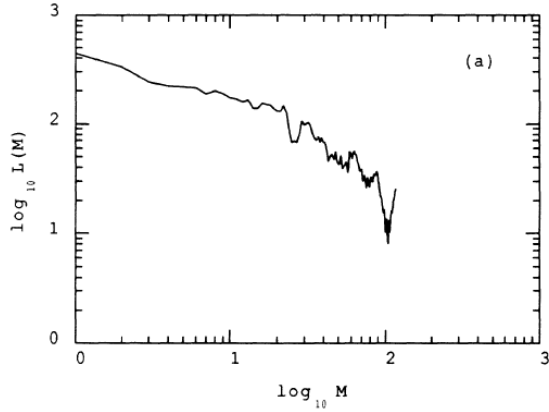
### Ш. ҮР ДҮН

Гурван уургийн фрактал хэмжээс болон өмнө судлаачдын хариутай харьцуулсан үр дүнг Хүснэгт 1-д үзүүлэв. Хүснэгт 1-д үзүүлсэн меохемеритрин (2mhr), фластоцианин (4pсу) ба субтлосин (1sbt) гэсэн гурван уургийн фрактал диаграммыг Ван нарын өгүүллэгээс авч өөрсдийн бодсон фрактал диаграммтай харьцуулсан үр дүнг Зураг 2-т үзүүлэв.

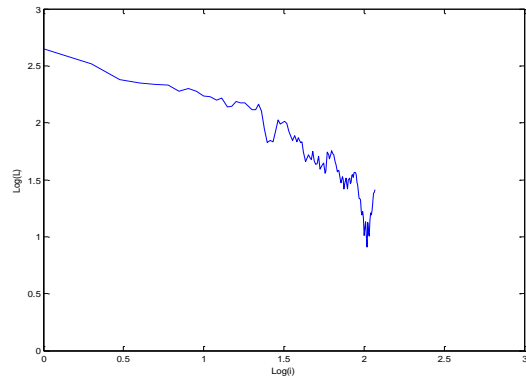
Хүснэгт 1. Ванг нарын бодсон уургийн D фрактал хэмжээстэй харьцуулсан хүснэгт. D-уургийн фрактал хэмжээс,  $\Delta D$ -стандарт алдаа.

Нэр	Уургийн нэр (PDB код)	Амин хүчил	D	$\Delta D$
Ванг	Меохемеритрин (2mhr)	118	1.60	0.08
Бид			1.60	0.08
Ванг	Фластоцианин (4pсу)	99	1.69	0.09
Бид			1.69	0.09
Ванг	Субтлосин (1sbt)	275	1.67	0.05
Бид			1.67	0.05

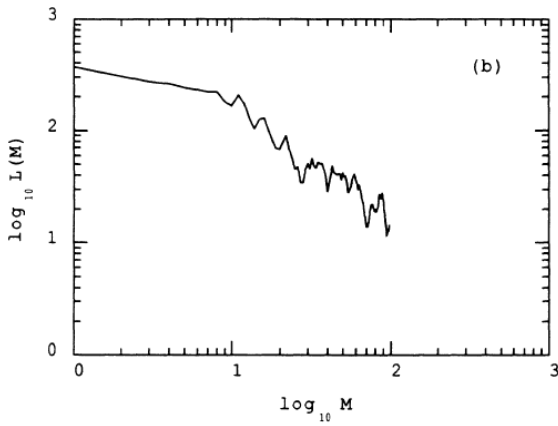
Зураг 2 (А). Меохемеритрин



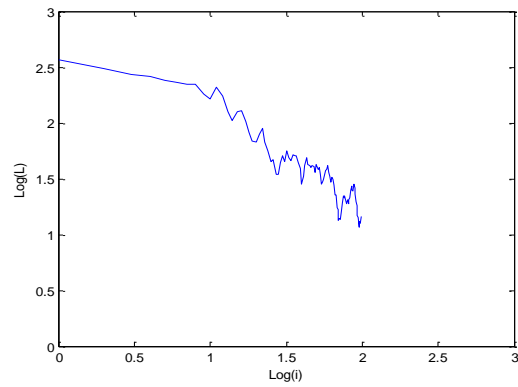
Зураг 2 (Г). Меохемеритрин (2MHR)



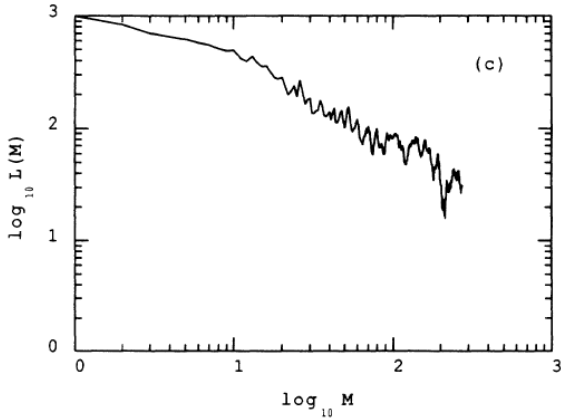
Зураг 2 (Б). Фластоцианин



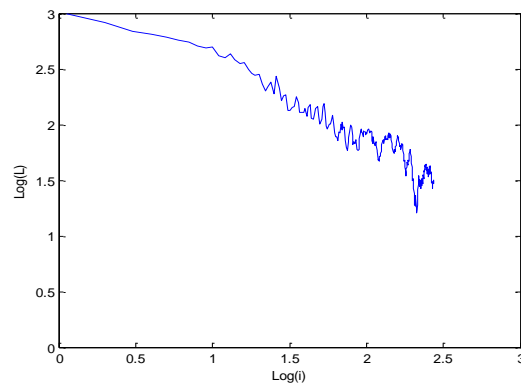
Зураг 2 (Д). Фластоцианин (4PCY)



Зураг 2 (В). Субтлосин



Зураг 2 (Е). Субтлосин (1SBT)



Зураг 2. Фрактал диаграммын харьцуулалт. Зураг 2 (А-В)-д Ванг нарын байгуулсан меохемеритрин, фластоцианин ба субтлосин гурван уургийн фрактал диаграмм. Зураг 2 (Г-Е)-д харгалзах уургуудын хувьд бидний тодорхойлсон фрактал диаграмм.

#### IV. ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Зураг 1-т үзүүлсэн гурван эрэмбийн Кохын муруйн фрактал хэмжээсийг бодож алгоритмыг шалгав. Кохын муруйн фрактал хэмжээсийн онолын утга нь 1.262 [4] ба бидний кодоор бодсон фрактал хэмжээсийн утгыг Хүснэгт 2-т үзүүлэв.

*Хүснэгт 2. Кохын муруйн гурван тохиолдлын фрактал хэмжээс.*

Кохын муруйн эрэмбэ	Цэгийн тоо	D	$\Delta D$
1	5	1.272	0.019
2	17	1.261	0.003
3	64	1.235	0.042

Хүснэгт 2-с үзвэл Кохын муруйн фрактал хэмжээсийн утга эрэмбэ ихсэхэд буурч байна. Бууралтын шалтгаан нь фрактал диаграмм байгуулахад ургын засварын хэмжигдэхүүн оруулж байгаатай холбоотой байж болох юм.

#### V. ДҮГНЭЛТ

Бид уургийн фрактал хэмжээс бодох код бичиж 3 уургийн бүтцийн фрактал хэмжээсийг бодож өмнө бодсон судлаачдын утгатай харьцуулав. Эндээс бидний бичсэн код зөв ажиллаж байгаа нь харагдав. Мөн Кохын муруйн 3 тохиолдлын фрактал хэмжээсийг бодож алгоритмд анализ хийв. Кохын муруйн фрактал хэмжээсийг бодоход эрэмбэ ихсэх тусам фрактал хэмжээсийн утга буурч . Энэ буурах шалтгаан нь фрактал хэмжээс бодох алгоритмын ургын засвартай холбоотой байна. Эндээс үзвэл алгоритмын ургын засварт нэмэлт өөрчлөлт оруулж фрактал хэмжээсийн утгыг илүү нарийн тодорхойлж болох юм.

#### ТАЛАРХАЛ

Энэ өгүүллэгийг бичихэд үнэтэй зөвлөгөө өгсөн Япон улсын Саппоро хотын Анагаах Ухааны Их Сургуулийн профессор Норико Мацүшимад талархал илэрхийлье.

#### ИШЛЭЛ

- [1] Bernstein, F.C., et al., *The Protein Data Bank: a computer-based archival file for macromolecular structures*. J Mol Biol, 1977. **112**(3): p. 535-42.
- [2] Chen, S.H. and J. Teixeira, *Structure and Fractal Dimension of Protein-Detergent Complexes*. Physical Review Letters, 1986. **57**(20): p. 2583-2586.
- [3] Helman, J.S., A. Coniglio, and C. Tsallis, *Fractons and the Fractal Structure of Proteins*. Physical Review Letters, 1984. **53**(12): p. 1195-1197.
- [4] Mandelbrot, B.B., *The fractal geometry of nature*. 1982, San Francisco: W.H. Freeman. 460 p., 1 leaf of plates.
- [5] Mandelbrot, B.B., How long is the coast of Britain? Statistical self-similarity and fractional dimension. Science, 1967. **156**: p. 3.
- [6] Cross, S.S., *Fractals in pathology*. J Pathol, 1997. **182**(1): p. 1-8.

- [7] Havlin, S.B.-A., D., *Fractal dimensionality of polymer chains*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1982. **15**: p. 6.
- [8] Havlin, S.B.-A., D., *New approach of analysing self-avoiding walks as a critical phenomenon*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1982. **15**: p. 4.
- [9] Havlin, S.B.-A., D., *Theoretical and numerical study of fractal dimensionality in self-avoiding walks*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1982. **26**: p. 7.
- [10] Isogai, Y.I., T., *Fractal Analysis of Tertiary Structure of Protein Molecule*. Journal of the Physical Society of Japan, 1984. **53**(6): p. 10.
- [11] Wang, C.X., Y.Y. Shi, and F.H. Huang, *Fractal study of tertiary structure of proteins*. Phys Rev A, 1990. **41**(12): p. 7043-7048.