КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМОПРОИЗВОЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ МИРА СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ВПЛОТЬ ДО ВОЗНИКНОВЕНИЯ ГЕНЕТИЧЕСКОГО КОДА

[1]Галимов Э.М., [2]Дементьев В.А.

Институт геохимии и аналитической химии им. Вернадского РАН, г. Москва

Предложена абстрактная модель мира органических молекул с простой системой возможных химических реакций. Создана имитационная программа, управляющая событиями в данной модели по принципу клеточного автомата. Показано, что существует такая система ограничений на реакции, которая с неизбежностью приводит к появлению структур, обладающих свойствами генетического кода.

Постановка задачи

Проблема возникновения жизни и биосферы как её специфического обиталища на Земле является одной из сложнейших проблем естествознания. Основная сложность связана с невозможностью непосредственного наблюдения за процессами генезиса во всем протяжении исторического времени и с принципиальной невозможностью воспроизведения условий генезиса в натурном эксперименте. Имеющийся в распоряжении естествоиспытателей экспериментальный материал относится только к уже сложившейся, ныне действующей космической открытой неравновесной системе, какой является биосфера Земли. Все имеющиеся палеографические данные позволяют проследить только позднюю историю эволюции генетического материала, накопленного в биосфере. Вопрос же об условиях появления генетического кода как основного признака самодвижения живого вещества в космосе и на Земле является открытым и, по-видимому, никогда не сможет быть прояснен в эксперименте. В связи с этим компьютерное моделирование представляется нам единственно доступным инструментом генерации и проверки гипотез о подходящих механизмах самоорганизации хаотического органического мира вплоть до появления носителей генетического кода.

Современная вычислительная техника, информационно-вычислительные технологии и опыт исследования поведения сложных органических соединений дают возможность впервые в мировой практике построить компьютерные модели весьма сложных событий в мире органических молекул, а не модели, проясняющие свойства отдельных молекул, как это было принято еще недавно. В настоящее время мы имеем возможность просматривать на компьютере ход событий в цепочках химических реакций с участием весьма сложных соединений. Стало возможно моделировать не только ход бимолекулярных реакций, оценивая напрямую вероятности протекания этих реакций, но и моделировать динамику случайного поиска участниками реакции друг друга в процессах хаотического теплового движения. Это и дает возможность наблюдать на компьютере процессы самоорганизации в органическом мире, а также находить условия, при которых такая самоорганизация становится возможной.

Среди описанных выше возможностей, которыми располагает сегодня лаборатория молекулярного моделирования ГЕОХИ, наиболее важной является возможность прямого вычисления вероятностей, как прохождения конкретных реакций, так и вероятностей случайных встреч между участниками хаотического молекулярного движения. Это позволяет не только получить качественную картину изменений органического мира в историческом времени, но и количественно оценить шансы того или иного механизма привести к эффекту глубокой самоорганизации исследуемого мира. В итоге можно отобрать наиболее вероятные механизмы из ряда конкурирующих предполагаемых механизмов.

Рассмотренные особенности проблемы и наличие в нашем распоряжении упомянутых исследовательских технологий позволяет считать реалистичной постановку компьютерного исследования процессов, которые могли привести в добиологическом мире к возникновению и к способности передачи в историческое будущее ценной генетической информации.

Целью данной работы является получение средствами компьютерного моделирования следствий из ранее высказанной гипотезы [1] о роли ограничений на возможные события в цепочках органических реакций, которые приводят к процессам направленного развития органического мира в сторону появления структур, способных к самовоспроизведению. Доказав в модельных компьютерных экспериментах работоспособность данной гипотезы и получив из нее ряд логических следствий, мы обеспечим возможность построения в дальнейшем теории самопроизвольной направленной сборки из специфического органического строительного материала таких молекулярных образований, которые приобретают свойства генетического кода.

Полный цикл намеченных нами исследований для достижения указанной цели состоит в построении моделей двух уровней сложности.

Модель первого уровня сложности должна описывать процессы хаотического движения в среде, состоящей из нескольких сортов абстрактных частиц, между которыми назначаются возможные химические реакции, подчиняющиеся заданным ограничениям. Таким образом, это совершенно абстрактная модель, реакционные свойства её составляющих только напоминают свойства членов реальных биохимических циклов. Поэтому модель не рассчитана на предсказание конкретных явлений, наблюдаемых в биохимическом эксперименте. Программа, реализующая эту модель, является имитационной. Цель такого моделирования состоит в получении следствий из приписанных ей реакционных свойств. При всей простоте исходных положений, заложенных в модель, получить все следствия из этих положений невозможно путем одних рассуждений. Смысл экспериментов с данной моделью состоит как раз в автоматическом получении этих довольно сложных следствий. Модель должна отражать как креативные, так и деструктивные свойства хаотического теплового движения. Креативные свойства сводятся к возможности образования новых структур при случайном столкновении частиц, представляющих собой исходный строительный материал. Возникающие при этом новые частицы могут представлять собой как промежуточные структуры, так и конечные структуры, способные передавать химическую информацию новым структурам, возникающим из первичного строительного материала и из промежуточных структур. Деструктивные свойства хаоса сводятся к ограничению времени жизни как промежуточных, так и конечных структур. С помощью данной модели мы должны найти такие условия, которые приводили бы к самопроизвольному наращиванию полезных промежуточных и конечных структур. Через некоторый промежуток исторического времени ожидается наступление баланса между конструктивными и деструктивными процессами, что приведет к динамическому равновесию в исследуемой системе. Это должно быть аналогом устойчивости любой экосистемы и биосферы в целом.

Модель второго уровня сложности должна описывать процессы химических превращений при парных столкновениях частиц, заданных в первой модели своими реакционными свойствами. С помощью этой модели мы должны подобрать такие конкретные химические структуры, которые в процессе бимолекулярных реакций удовлетворяли бы ограничениям, заданным нами в первой модели. Задача сводится к поиску работоспособных химических структур, электронные и колебательные состояния которых позволяли бы им участвовать в механизмах развития и сохранения генетического кода, предсказанного в работах с первой моделью.

Предварительные результаты, полученные в исследованиях с моделями первого уровня сложности, были опубликованы в [2]. В данной работе значительно подробнее обсуждаются

принципы компьютерного моделирования, предложенные нами в предпринятых исследованиях. Мы полагаем, что наш подход к построению динамических моделей сложных химических систем может оказаться полезным и в других областях компьютерного моделирования сложных систем.

Методы моделирования, использованные в компьютерных экспериментах

Упомянутая выше модель первого уровня сложности строится как клеточный автомат, управляемый генератором случайных чисел. В каждой клетке модели может находиться одна из частиц из числа действующих лиц описываемого мира. Такой частицей может быть либо частица изначально заданного строительного материала, либо частица, возникающая в результате реакции, протекающей при случайном столкновении двух частиц. На каждом историческом шаге генератор случайных чисел организует встречу каких-то двух частиц. Результат встречи задается описанием ограничений на возможные события. Программа следит за событиями в модели и отражает динамику изменения численности популяций частиц всех сортов, присутствующих в данном абстрактном мире. При многочисленных прогонах программы мы имеем возможность изменять как номенклатуру частиц, так и ограничения на возможные взаимодействия частиц. Такие эксперименты по исследованию динамики развития мира проводятся до тех пор, пока не удастся наблюдать удовлетворительную скорость накопления и последующей стабилизации самовоспроизводящихся сложных структур-носителей генетического кода. Таким образом, решая ряд прямых задач моделирования саморазвития мира, мы решаем и обратную задачу. Тем самым мы проясняем условия возникновения структур, обладающих способностью накапливать и передавать в будущее генетическую информацию.

Поясним кратко те основные положения, которые позволяют нам отобрать состав объектов компьютерной модели и назначить им условные реакционные свойства. Подробно эти положения обоснованы в [1].

Известно, что все биохимические реакции в живых системах проходят благодаря каталитическим свойствам полипептидов. Именно структура конкретного полипептида определяет возможность и скорость каждой реакции. Поэтому наша модель обязательно должна содержать частицы, напоминающие своими реакционными свойствами аминокислоты и образуемые ими полипептидные цепочки. В нашей модели каждая аминокислота представлена неким абстрактным символом, буквой, а полипептидные цепочки представлены линейными текстами. Имитация информационной стороны феномена жизни должна состоять в возникновении текстов, многократно повторяемых в историческом времени. Известно также, что полипептиды легко полимеризуются, но совершенно не способны к саморепликации. Поэтому мир, состоящий из одних аминокислот и полипептидов, не способен передавать вперед случайно возникшие тексты.

Известно, что полинуклеотиды способны к саморепликации под благотворным влиянием полипептидов, но они являются плохими катализаторами и, в отличие от пептидов, не способны управлять химическими реакциями. Мир, состоящий из одних только нуклеотидов, не способен к далекой эволюции. Известно, что в реальных живых системах тримеры нуклеотидов (кодоны) задают структурное соответствие между полинуклеотидами и полпептидами. Соответственно этому, наша модель содержит частицы, напоминающие кодоны и цепочки линейных последовательностей кодонов. Каждый кодон представлен неким абстрактным символом, буквой, а полинуклеотидные цепочки представлены линейными текстами. Мы используем креативную роль пептидных цепочек, требуя их участия в полимеризации кодонов. Иначе говоря, мир, состоящий из одних только кодонов не способен сам по себе создать полинуклеотидные тексты как последовательности кодонов.

Таким образом, для возникновения и для самовоспроизведения биологически осмысленных текстов объекты, подобные полипептидам, должны скооперироваться с объектами, подобными полинуклеотидам, в каких-то взаимодействиях обучиться порождать

длинные тексты и повторять их в будущем в нарастающих количествах. Требование способности абстрактного химического мира к размножению одинаковых текстов связано с нашим желанием учесть в модели такую важную реальность, как тепловое движение с его деструктивными свойствами. Тепловое движение разрушает любые сложные химические образования. Поэтому стационарное состояние моделируемой системы может наступить только в результате противоборства дух тенденций – ускоренного накопления одинаковых текстов и их разрушения тепловым движением частиц.

Для имитации деструктивного теплового движения мы вводим в модель абстрактные горячие частицы. Химически они нейтральны, но при встрече со сложными объектами они способны их разрушать. Физически эти частицы соответствуют фоновому веществу, в котором происходят все описываемые в модели события, вернее, это горячий хвост статистического распределения фоновых молекул. Поэтому, варьируя количество горячих частиц в модели, мы имитируем температуру среды.

Мы определили основные объекты, включаемые в модель. Остается определить, как должны кооперироваться полипептиды и нуклеотиды, чтобы возник ожидаемый результат. Это основной вопрос данного исследования. Конечно, хотелось бы, чтобы компьютерная программа самостоятельно нашла те реакционные способности основных объектов и те промежуточные формы, которые привели бы к реалистичному сценарию возникновения и закрепления генетического кода. Но модель первого уровня сложности принципиально не способна предсказывать реакционные способности своих абстрактных объектов. Этого можно ожидать от модели второго уровня сложности, где просматриваются электронные и колебательные свойства конкретных молекулярных структур. А пока нам приходится методом проб и ошибок подбирать и назначать реакционные способности основным и производным объектам нашей модели, чтобы, в конце концов, получился работоспособный сценарий возникновения и поддержания генетического кода на абстрактом уровне. В данной работе мы пошли на поводу у известных биохимических фактов, допустив в модели появление таких производных объектов, которые напоминают реальные биохимические объекты.

Может возникнуть законный вопрос: какова научная ценность проведенного исследования, если мы приписываем модели известные свойства? Ответ прост – мы подсматриваем в природе свойства объектов, которые участвуют в работе отлаженного Природой механизма воспроизведения генетического кода, но мы не знали, достаточны ли эти свойства для возникновения генетического кода. Проведенное нами исследование показывает, что генетический код с неизбежностью возникает и поддерживается, если выполняются проясненные нами минимальные и сравнительно простые необходимые и достаточные условия. Мы пробовали варьировать эти условия и убедились, что выявленные в компьютерных экспериментах и приведенные ниже реакционные способности основных и производных объектов нашей модели являются оптимальными.

Заметим, что мы не вводили в модель такой важный объект, как универсальный источник энергии, как молекулу АТФ. Будем считать, что этот объект незримо присутствует во всех рассматриваемых ниже реакциях.

Программная реализация модели

Основные и производные объекты предложенной модели перечислены в таблице. Обозначения объектов соответствуют именам объектов в программе, написанной на языке Visual Basic.

Типы частиц, их происхождение и реакционные способности

Номер типа	Название частицы в программе	Варианты структуры частицы	Происхождение частицы
1	Hot	Hot	Задается при описании начального состояния мира. Эта нейтральная в химическом плане частица обладает повышенной энергией теплового движения и способна разрушать сложные частицы других типов.
2	Like_α	Мономеры αi. Олигомеры и полимеры $\Pi\alpha i = \alpha i \alpha j ... \alpha n$	Мономер, подобный аминокислоте, задается при описании начального состояния мира или возникает при разрушении олигомера 2. Олигомер возникает при столкновении 2-2 или при разрушении частицы типа 6. Так в системе появляются полипептиды.
3	Like_A	Мономеры Ai. Олигомеры и полимеры ΠAi = AiAj...An	Мономер, подобный кодону, задается при описании начального состояния мира. Олигомер возникает при разрушении частиц типа 4; при столкновении олигомера 3 с олигомером 2, если структура 2 полностью соответствует структуре 3 (в этом случае 2 играет роль эффективное полимеразы).
4	Like_AαA	Промежуточный комплекс из двух частиц типа 3 и олигомера 2.	Образуется при столкновении частицы типа 3 с олигомером типа 2 достаточной длины. Сначала возникает неполный комплекс. При столкновении с частицей типа 3, длина которой не превышает длину содержащейся в комплексе частицы 2, комплекс достраивается. При его разрушении частицей 1 он распадается на частицу типа 3, являющуюся суммой исходных частиц 3 в комплексе, и на неизменную частицу 2. Это единственный механизм, позволяющий возникать и удлиняться частицам 3 (полинуклеотидам).
5	Like_Rα	Частица, обладающая свойствами транспортной РНК.	Возникает при разрушении комплекса 4 частицей 1. Удлинившийся в результате этого олигомер 3 приобретает свойства частицы 5, если в его структуре обнаруживается пара кодон-антикодон и если в пуле олигомеров типа 2 имеется частица со свойствами α-аминоацил-t-РНК-синтетазы (на обоих концах олигомера имеется соответствующий кодону аминокислотный остаток).
6	Like_αRα A	Промежуточный комплекс из олигомера 3 и частиц типа 2, соединившихся с соответствующими частицами 5 .	Комплекс возникает при столкновении олигомера 3 с частицей 5, структурно соответствующей первому кодону в олигомере. Считается, что частица 5 присоединяет к олигомеру 3 соответствующую частицу 2, а сама при этом высвобождается. Далее этот недостроенный комплекс отыскивает в пуле частиц 5 все недостающие частицы, структурно соответствующие кодонам олигомера 3. Возникает комплекс полинуклеотида с транскрибированной на нем полипептидом. Обе цепи высвобождаются при столкновении с частицей 1.

Из приведенных в таблице данных о реакционных способностях объектов модели видно, что мы в явном виде учитываем важный биохимический факт, а именно, возможность взаимного распознавания кодонов и аминокислотных остатков. В программе эта способность объектов поддерживается введенным в программу словарем Кодон-Аминокислота. Этот словарь играет важнейшую роль в ходе выполнения программы. Поэтому объясним его происхождение и структуру.

На самом деле программная имитация процессов возникновения генетического кода проводилась в два этапа. На первом этапе было получено доказательство возможности самопроизвольного возникновения словаря Кодон-Аминокислота. На втором этапе была показана возможность самоорганизации химического мира вплоть до воспроизведения последовательностей аминокислотных остатков в длинных цепях полипептидов.

Программа первого этапа имитировала возникновение в химическом мире таких аминокислот, которые соответствовали бы кодонам из заданного набора. Имитация основывалась на известном факте, что молекулы распознают друг друга в химической реакции только при определенном соответствии их эквипотенциальных поверхностей. Такие поверхности в программе кодировались изображающими шестнадцатиричными числами. Учитывался известный факт, что в природе нашлись такие четыре нуклеотида, которые обладают попарно комплиментарными свойствами и способны самостоятельно соединяться в триплеты-кодоны. Этим нуклеотидам были приписаны следующие четырехзначные изображающие числа,

A – H5555
C – H3333
G – H0F0F
U – H00FF,

которые введены в программу в качестве исходных данных.

Каждый кодон в программе изображается двенадцатизначным изображающим числом. Например, один из кодонов, кодирующих лейцин - CUG, изображается числом H333300FF0F0F. Программа строит таблицу из всех 64 возможных кодонов. Аминокислоту изображаем также двенадцатизначным числом и требуем, чтобы структурное соответствие аминокислоты своему кодону распознавалось с помощью условия: логическое произведение изображающих чисел аминокислоты и кодона должно быть равно нулю. Это означает, что выступу на поверхности одной молекулы (двоичная единица) может соответствовать только впадина (двоичный ноль) на поверхности другой взаимодействующей молекулы. Совпадение двух впадин не мешает взаимодействию, а лишь его ослабляет.

Программа генерирует последовательность случайных изображающих чисел, имитируя тем самым различные аминокислоты. Каждое новое число испытывается на соответствие какому-либо из кодонов. Отбираются те числа, которые соответствуют одному или нескольким кодонам. Последнее говорит о вырождении биологического кода. Например, найдется случайное число HCCCFF008000. Оно даст ноль при логическом умножении на изображающее число кодона CUG. То же самое будет получаться и при испытании кодонов CUA, CUC, CUU. Так обнаружится вырожденный код лейцина. В результате работы программы автоматически получается известный словарь универсального биологического кода. Диалекты мы не рассматривали.

Эксперименты с данной программой показали, что получение каждого нужного изображающего числа в результате генерации сразу двенадцатизначного шестнадцатеричного числа требует необозримого машинного времени. Если же поручить программе подобрать сначала первую четверку разрядов (соответствие первому нуклеотиду в кодоне), закрепить успех, а затем таким же образом подбирать вторую и, наконец, третью четверку разрядов, то на всю работу уходят секунды. Такой прием генерации нужных нам изображающих чисел нельзя считать искусственным, поскольку известны биофизические процессы, основанные на стратегии поиска с закреплением успеха.

Найденным на первом этапе изображающим числам мы приписали известные названия 20 аминокислот. Коды этих аминокислот мы вводим в программу второго этапа. Пользуясь описанным условием соответствия изображающих чисел, программа самостоятельно составляет рабочие словари кодонов и кодируемых ими аминокислот. Это позволяет программе работать с числами (номерами частиц в словарях), а не с символьными изображениями частиц, участвующих в реакциях. При выдаче окончательных результатов

прохождения реакций могут быть восстановлены символьные изображения получающихся полипептидов и полинуклеотидов.

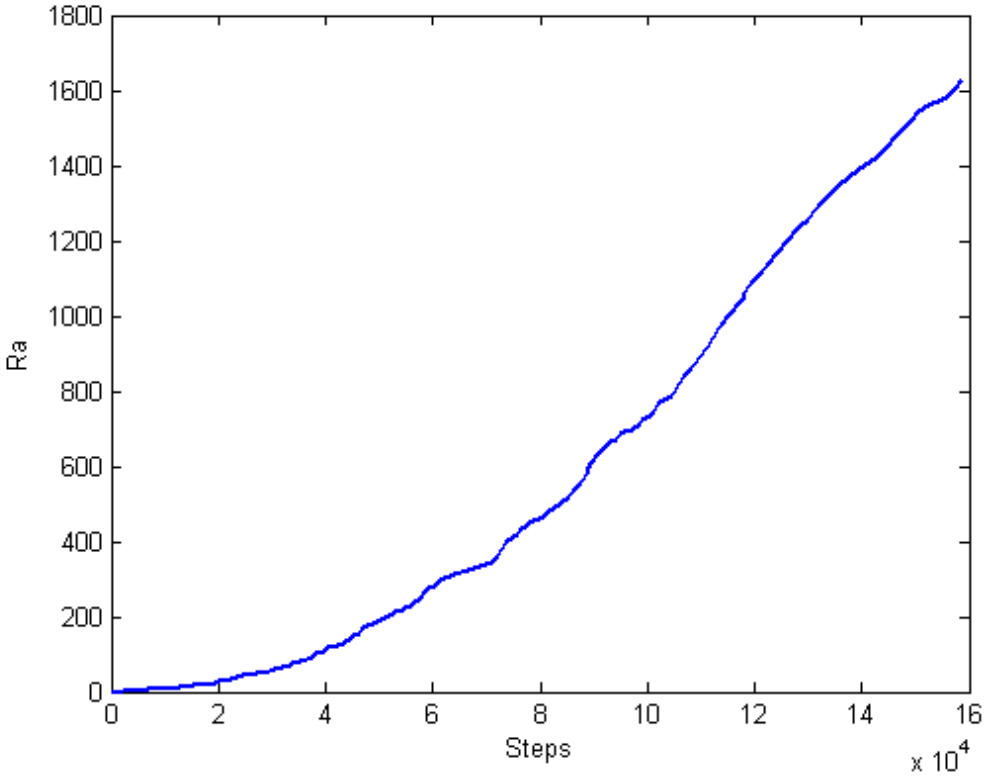
Программа второго этапа построена по принципу клеточного автомата. Имитация химического мира выполняется на квадратном поле размером 200x200 клеток. Пустые клетки имитируют биологически нейтральный фон. Заполненные клетки содержат частицы тех типов, которые были описаны выше. Каждая частица характеризуется типом, размером входящих в нее цепей, составом цепей. Полипептидная цепь, кроме того, несет признак кодированности, если эта цепь получилась в результате транскрипции с цепи РНК.

Исходное состояние мира задается распределением по полю аминокислот, кодонов и горячих частиц. В компьютерном эксперименте мы задаем начальное количество частиц каждого из этих трех типов. Программа случайным образом выбирает экземпляры кодонов и аминокислот из рабочих словарей и случайно распределяет их по полю. Горячие частицы считаются одинаковыми и также случайно распределяются по свободным клеткам поля.

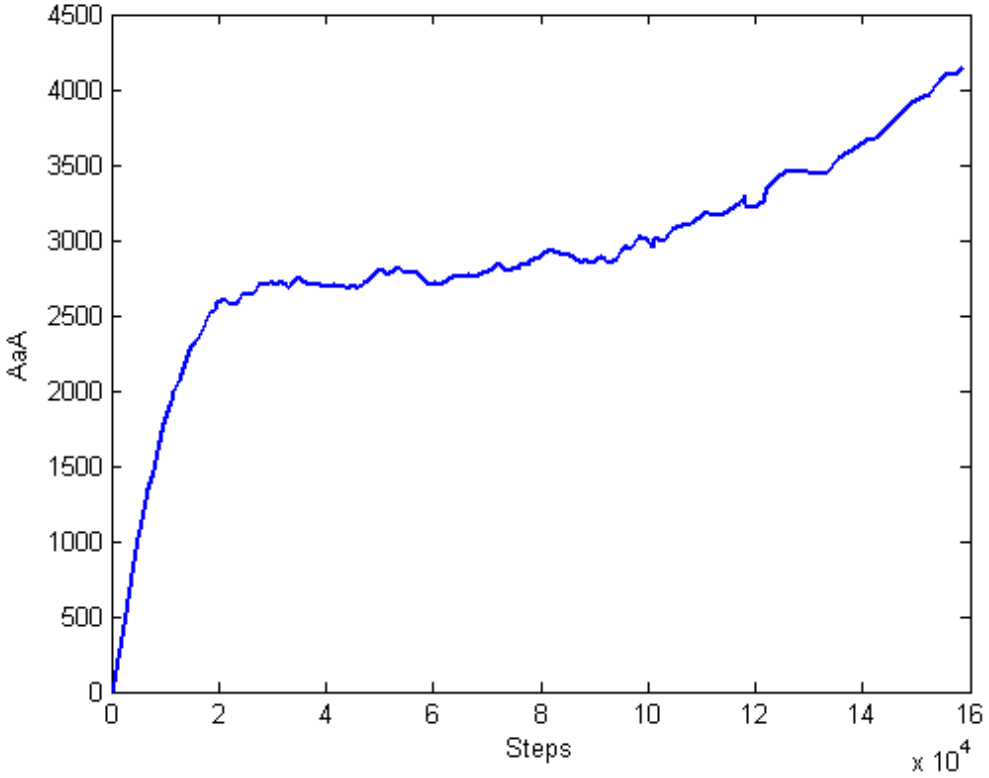
Работа программы состоит в выполнении шагов, имитирующих течение исторического времени. На каждом шаге программа случайным образом находит в поле две частицы и проверяет, способны ли они взаимодействовать друг с другом. Шаг считается состоявшимся, если нашлась подходящая пара частиц, и реакция проведена. Реакции проводятся по описанным выше правилам. Если короткие цепи полипептидов или полинуклеотидов включаются в более сложные комплексы, то программа добавляет в поле случайные аминокислоты или кодоны, поддерживая начальное количество частиц этих типов. Так имитируется открытость моделируемой химической системы и обеспечивается возможность перехода системы в некое стационарное состояние. Эксперименты в условиях исчерпания строительных материалов пока не проводились.

По мере выполнения шагов программа по желанию исследователя накапливает во внешней памяти информацию о состоянии моделируемого мира для некоторых моментов исторического времени. Эту информацию можно проанализировать и судить по некоторым выбранным признакам, какова динамика самоорганизации данного мира.

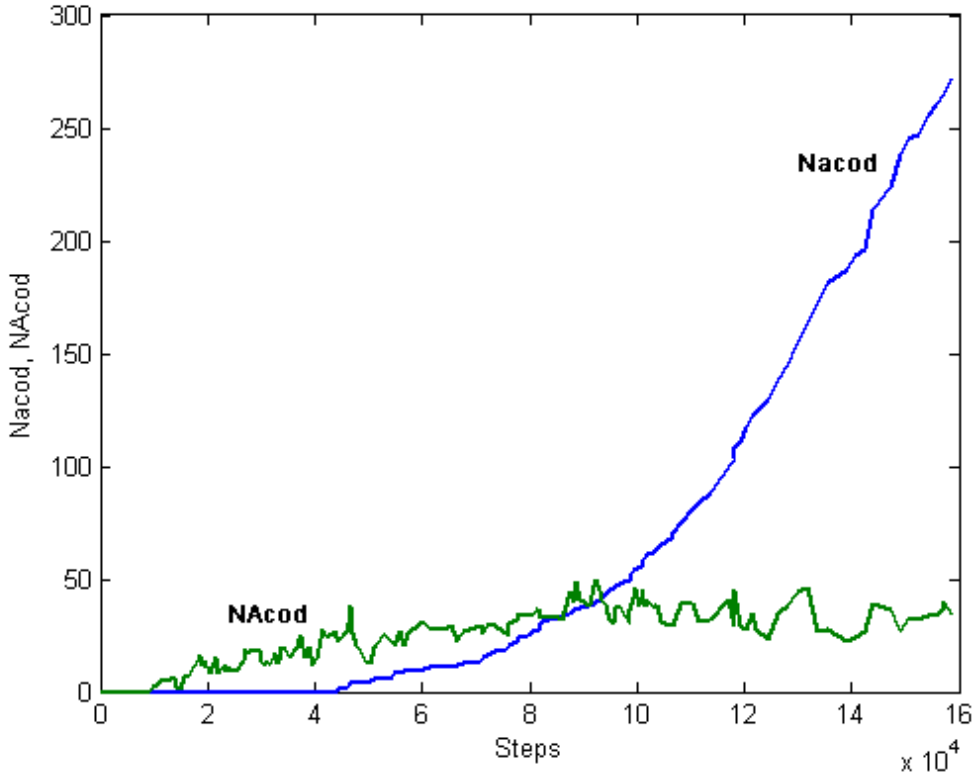
На приведенных ниже рисунках показаны результаты одного из экспериментов. В начальном состоянии в модели насчитывалось 400 кодонов, 400 аминокислот и 50 горячих частиц. Предварительные эксперименты показали, что такое начальное состояние обеспечивает наилучшую динамику самоорганизации мира. Более холодный мир (число горячих частиц заметно меньше 50) не развивается, поскольку возникающие сложные комплексы цепей не разделяются ударами горячих частиц на индивидуальные длинные цепи. Более горячий мир (число горячих частиц заметно больше 50) развивается очень медленно, поскольку возникающие длинные цепи интенсивно разрушаются ударами горячих частиц. Эти наблюдаемые в компьютерном эксперименте закономерности соответствуют известному факту, что биологические процессы проходят в сравнительно узком интервале температур.



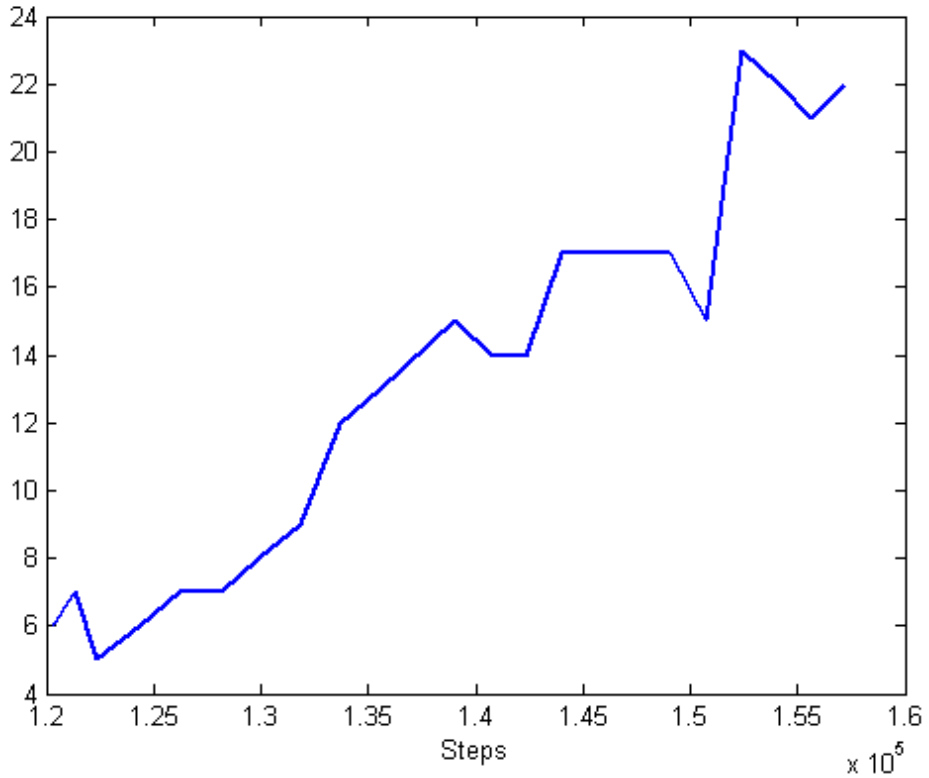
Динамика накопления комплексов Ra



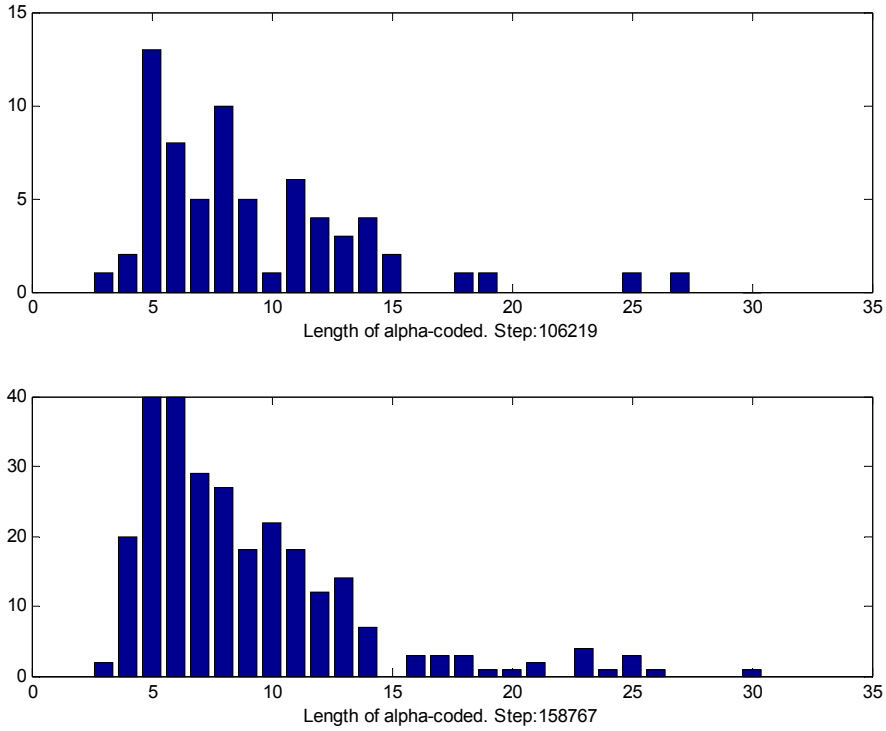
Динамика накопления комплексов AaA



Динамика накопления кодированных цепей плинуклеотидов Acod и полипептидов acod.



Динамика накопления совпадающих текстов в кодированных цепях полипептидов.



Гистограммы длин кодированных полипептидов на двух шагах работы программы

Из приведенных рисунков видно, что в имитационном эксперименте наблюдаются и другие закономерности, согласующиеся с биологической реальностью и с фактами ранней эволюции биосферы. Например, кодированные полипептидные цепи возникают, лишь спустя длинный инкубационный период, после чего начинается бурный рост, как их числа, так и длин. Анализ текстов кодированных полипептидов показывает, что с течением исторического времени всё большее число совпадающих аминокислотных последовательностей начинает встречаться не только в цепях одинаковой длины, но более длинные цепи начинают включать в себя более короткие, ранее образовавшиеся последовательности.

Технически возможно объединить два описанных этапа в один. Тогда нам не пришлось бы готовить заранее и вводить в программу словарь Кодон-Аминокислота. В такой обобщенной программе понадобится ввести только шестнадцатеричную кодировку четырех избранных нуклеотидов и задать аналогичные начальные условия. При добавлении частицы типа аминокислоты программа должна была бы генерировать случайное четырехзначное число до выполнения условия соответствия первому нуклеотиду любого кодона из их полного набора. После аналогичного подбора второй и третьей части изображающего числа программа самостоятельно узнавала бы, какая подходящая аминокислота случайно сгенерирована. Дальше программа работала бы по сценарию второго этапа, и результаты были бы такими же. Мы разделили процесс моделирования на два этапа ради упрощения алгоритмов и сокращения времени работы. В результате эксперимент потребовал скромных вычислительных ресурсов, и был проведен на персональном компьютере в системе Visual Basic 6.

Мы формально ввели в Словарь программы терминирующие кодоны ради полноты набора кодонов, но не стали исследовать их влияние на поведение системы. Это не сделано, поскольку в нашей нынешней модели пока предусмотрен единственный механизм репликации полинуклеотидов. Он срабатывает при столкновении полинуклеотида с полипептидом, структурно соответствующим полинуклеотиду. Такой полипептид условно считается эффективной полимеразой и вызывает репликацию полинуклеотида. При наличии

в случайно образовавшейся структуре полинуклеотида терминирующего кодона такому полинуклеотиду в нашей модели не может найтись структурно соответствующего полипептида, поскольку в словаре нет аминокислоты, кодируемой таким кодоном. Поэтому такой полинуклеотид не может быть реплицирован. При столкновении с горячими частицами он будет постепенно укорачиваться, пока не исчезнет. Таким образом, присутствие терминирующих кодонов в словаре программы пока только замедляет скорость развития моделируемой системы. Мы не можем считать это принципиальным недостатком нашей модели, поскольку в нашу задачу не входит моделирование уже сложившегося генетического кода, действующего в реальных биологических системах. Мы моделируем добиологическую химическую систему, в которой мог возникнуть прототип современного биологического кода. В дальнейшем мы введем в нашу программу условный механизм репликации полинуклеотидов с терминирующими кодонами. Тогда мы сможем заметить влияние терминирующих кодонов на рост кодированных полипептидов.

Заключение

В данной работе средствами компьютерного моделирования показана достаточность приведенных в статье правил взаимодействия кодонов и аминокислот для самопроизвольного возникновения генетического кода, причем словарь Кодон-Аминокислота можно не навязывать модели, а поручить его генерацию программе. Это соответствует положению, что в природе лишь некоторые аминокислоты самостоятельно нашли соответствие определенным кодонам и по похожему сценарию закрепили свойство так кооперироваться с полинуклеотидами, чтобы передавать эту важную информацию в будущее. Остальные возможные аминокислоты не смогли войти в эти процессы и остались за бортом жизни.

Проведенные нами компьютерные эксперименты приводят нас к важному выводу, что одни и те же реакционные особенности вошедших в модель частиц достаточны и для зарождения генетического кода, и для его поддержания в процессе дальнейшей эволюции нашего абстрактного символического мира. В реальном химическом мире, конечно, случились серьезные эволюционные изменения. Например, была сконструирована рибосома, на которой в нынешнем живом мире происходит трансляция генетического кода. Но нам представляется важным, что даже без такого усовершенствования зародившийся генетический код мог бы поддерживать свою деятельность в сравнительно простой химической системе. Это четко видно из результатов работы нашей имитационной программы.

Нам также представляется существенным, что навязанные абстрактным частицам реакционные свойства являются весьма реалистичными. В них обобщен огромный фактический материал, накопленный в биохимии. И здесь прослеживается такая причинно-следственная цепочка. Реакционные свойства реальных полипептидов и полинуклеотидов с неизбежностью следуют из их химических структур. Структуры органических соединений при их огромном разнообразии жестко задаются волновыми свойствами микрочастиц - ядер и электронов. Всё разнообразие структур органических соединений описывается небольшим числом правил структурной классической химии. А в многочисленных исследованиях, выполненных средствами квантовой химии, показано, что структурные особенности конкретных органических соединений получаются автоматически как следствия решений уравнения Шредингера. То есть правила структурной классической химии прямо следуют из механических свойств электрона. Поэтому можно выдвинуть такой тезис - Природа, создав электроны и нуклоны, заложила в них возможность самоорганизации будущего химического мира и появления в нем генетического кода как внутренней основы феномена жизни.

Здесь мы решительно расходимся с мнением М. Эйнгорина, что выявленная им в материалах первой сессии данной конференции красота и логическая стройность действующего ныне универсального генетического кода не могла появиться без участия

Высшего Разума. Огромный химический, геохимический, биохимический и биологический материал, обобщенный в [1], наш опыт молекулярного моделирования, а также полученные в данной работе результаты позволяют нам утверждать, что структура ныне действующего генетического кода изначально заложена в электрические и механические свойства частиц и в значения мировых констант, которые управляют физическим поведением вещества в космосе. Более того, пока не представляется возможным найти среди известных классов органических соединений такие два класса, представители которых могли бы так удачно найти и использовать друг друга, как нашли друг друга нуклеотиды и полипептиды. Только компьютерные эксперименты с моделями второго уровня сложности смогут показать нам, могут ли, в принципе, обнаружиться такие новые классы соединений. Таким образом, нынешнее состояние наших знаний приводит нас к убеждению, что в каком бы уголке космоса ни были созданы подходящие физические условия для самопроизвольно возникающих органических соединений, при накоплении достаточной номенклатуры этих соединений они с неизбежностью и однозначно сформируют химические системы, способные к саморазвитию и и с ныне известным универсальным генетическим кодом.

Литература

1. *Галимов Э.М.* Феномен жизни. М.: Эдиториал УРСС, 2001.
2. *Галимов Э.М., Дементьев В.А.* ДАН, 2004 (в печати)

Выполнено при финансовой поддержке проекта № 25 Президиума РАН "Проблемы зарождения и эволюции биосферы".