

Статистический анализ динамики липидов в биологической мембране: развитие и перспектива метода главных компонент

П.И. Буслаев¹, Л.А. Хакимова¹, В.И. Горделий^{1,2,3}, С.В. Груднин⁴, И.Ю. Гушин^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Institut de Biologie Structurale, 38000 Grenoble, France

³Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Juelich, 52425 Juelich, Germany

⁴NANO-D, INRIA Grenoble Research Center, 38334 Saint Ismier Cedex, Montbonnot, France

Моделирование биологических мембран методом молекулярной динамики (МД) является удобным подходом для определения как свойств самих мембран, так и аспектов взаимодействия мембран с небольшими молекулами или белками. В основе МД лежит численное решение уравнений классической механики Ньютона для системы взаимодействующих частиц. В связи с большим размером и сложностью исследуемых систем, существует множество наборов параметров (силовых полей), определяющих характер связи между двумя частицами. Основными критериями, которые позволяют оценить качество силового поля, являются макропараметры бислоя, такие как площадь, приходящаяся на одну молекулу липида, толщина мембраны и другие.

Основными направлениями исследований в области моделирования биологических мембран являются:

1. Изучение влияния силового поля, параметров расчета и ряда других критериев на свойства мембран
2. Ускорение расчётов, путём уменьшения степени детализации силового поля
3. Изучение влияния на свойства мембраны различных добавок в чистый липидный бислой

В данном докладе показано, как метод главных компонент может применяться в любой из вышеперечисленных областей. При использовании данного метода, помимо анализа макроскопических параметров мембраны, появляется возможность для изучения динамических свойств отдельных молекул. Метод позволяет сравнивать различные силовые поля, в том числе и силовые поля с меньшей степенью детализации (крупнозернистые), качественно и количественно, а также системы с и без добавок между собой. В данной работе проведён анализ полноатомных силовых полей GAFF, Lipid14, Berger, CHARMM27, CHARMM36, GROMOS 43a1-s2, GROMOS 54a7 и Slipids, а также крупнозернистого силового поля Martini. Полученные результаты позволяют охарактеризовать различные свойства биологических мембран с точки зрения отдельной молекулы.

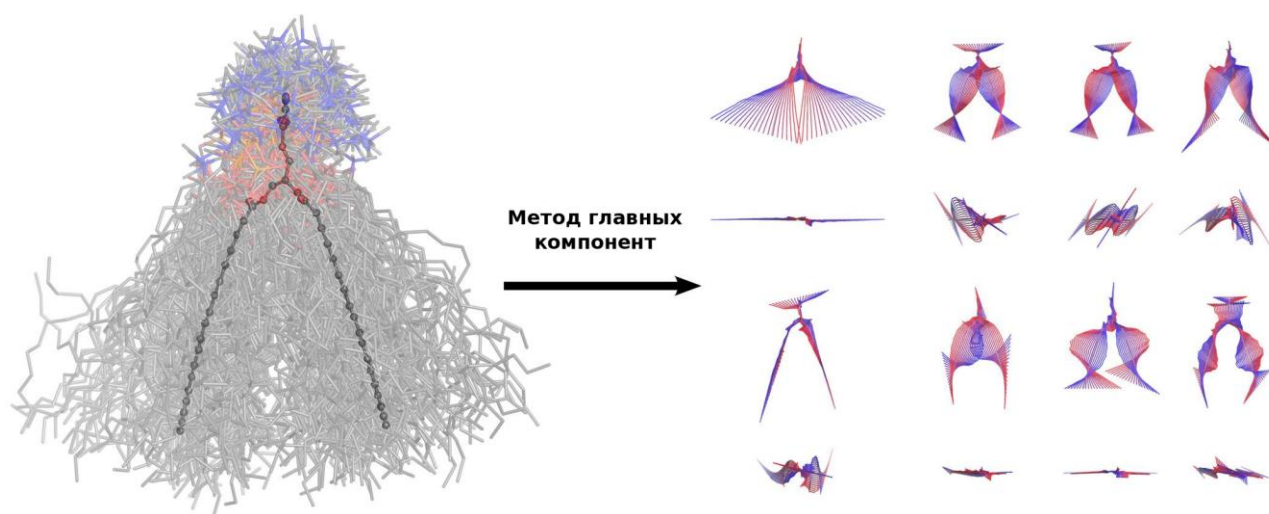


Рис. 1. Анализ конформационной динамики молекулы липида с помощью метода главных компонент

Литература

1. *Pavel Buslaev, Valentin Gordeliy, Sergei Grudin, Ivan Gushchin*. Principal component analysis of lipid molecule conformational changes in molecular dynamics simulations. - *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2016.
2. *Shirley W.I. Siu, Robert Vacha, Pavel Jungwirth and Rainer A. Bockmann*. Biomolecular simulations of membranes: Physical properties from different force fields. - *The Journal of Chemical Physics*, 2008.
3. *Thomas J. Piggot, Angel Pineiro and Syma Khalid*. Molecular Dynamics Simulations of Phosphatidylcholine Membranes: A Comparative Force Field Study. - *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2012.
4. *Jolliffe I.T.*, *Principal Component Analysis*. - Springer, 2002.