

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ ДЛЯ АНАЛИЗА КОНФОРМАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ ЛИПИДНЫХ МОЛЕКУЛ

Мустафин Х.С., Буслаев П.И.¹, Гушин И.Ю.

Московский физико-технический институт,
Россия, 141700, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.,
E-mail: ivan.gushchin@phystech.edu

¹Университет Йювяскюля, Финляндия, г. Йювяскуля
E-mail: pbuslaev@gmail.com

Для изучения биологических мембран используют такой компьютерный подход, как моделирование методом молекулярной динамики. Этот метод дает возможность исследования больших липидных систем и влияния на них различных внешних факторов, таких как температура или присутствие низкомолекулярных соединений. Несмотря на широкое использование молекулярной, поведение липидов в основном изучалось качественно, а подробное количественное описание конформаций и динамики липидных молекул отсутствовало. В наших предыдущих работах был предложен способ количественного анализа и описания конформационной динамики отдельной липидной молекулы, основанный на методе главных компонент [1]. Такой подход позволяет определить основные коллективные движения атомов липидной молекулы вдоль главных компонент, характерные временные масштабы, а также дает возможность оценить влияние использования различных силовых полей и температуры на конформации липидных молекул при моделировании [2].

Целью данной работы было развитие метода анализа динамики липидов при помощи метода главных компонент. Мы представляем программное обеспечение с открытым исходным кодом PCALipids для автоматического анализа и сравнения траекторий молекулярной динамики различных липидных систем [3]. Продемонстрировано использование PCALipids для оценки влияния таких факторов, как температура, кривизна и концентрации холестерина, на конформационную динамику липидных молекул.

Литература

1. Buslaev P. et al. Principal Component Analysis of Lipid Molecule Conformational Changes in Molecular Dynamics Simulations // J. Chem. Theory Comput. 2016. Vol. 12, № 3. P. 1019–1028.
2. Buslaev P., Gushchin I. Effects of Coarse Graining and Saturation of Hydrocarbon Chains on Structure and Dynamics of Simulated Lipid Molecules // Sci. Rep. 2017. Vol. 7, № 1. P. 11476.
3. Buslaev P., Mustafin K., Gushchin I. Principal component analysis highlights the influence of temperature, curvature and cholesterol on conformational dynamics of lipids // Biochim. Biophys. Acta - Biomembr. 2020. Vol. 1862, № 7. P. 183253.