

РЕДАКТИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ И ТОПОЛОГИЙ МОЛЕКУЛ ДЛЯ ПРОГРАММЫ GROMACS

Андреева Е.А., Армеев Г.А., Шайтан А.К.

Кафедра биоинженерии, биологический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова; Россия, 119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12; e-mail: andreeva.elizaveta.2015@post.bio.msu.ru

Молекулярная динамика (МД) – широко распространенный инструмент для исследования биологических макромолекул. Необходимый компонент МД — силовое поле, от качества которого зависит достоверность и воспроизводимость исследований. Наборы параметров силового поля для наиболее распространённых составляющих биомолекул считаются устоявшимися, однако при появлении нестандартных соединений (модифицированных аминокислот, разнообразных сахаров и полимеров) появляется необходимость отдельного подбора параметров. Подбор параметров силовых полей можно производить с помощью разнообразных сервисов (SwissParam [1] и другие); тем не менее, применение подобных сервисов ограничено параметризацией молекул лигандов, а не модифицированных аминокислот или нуклеиновых оснований.

Одной из широко используемых для МД программ является GROMACS [2]. На данный момент для неё не существует инструментария, позволившего бы просматривать, корректировать и дополнять файлы её топологий в интерактивном режиме. Предложенное нами решение представляет собой программную библиотеку GIFTEd (Gromacs Interactive Forcefield and Topology Editor), позволяющую визуализировать, модифицировать и создавать новые файлы структуры и топологии, совместимые с GROMACS, что облегчает ручную параметризацию и постановку молекулярно-динамических экспериментов при наличии в системе нестандартных аминокислот, нуклеотидов, сахаров и других мономеров. Разработанная нами библиотека была применена для параметризации тимидиновых нуклеотидов, меченных флуоресцентными красками Cy3 и Cy5.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-74-10006. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

1. Zoete V., Cuendet M.A., Grosdidier A., Michielin O. SwissParam: A fast force field generation tool for small organic molecules. // *Journal of Computational Chemistry*, V.32, 2011. P. 2359-2368.
2. Abraham, M. J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J. C., Hess, B., & Lindahl, E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. // *SoftwareX*, V1. 2015. P. 19-25