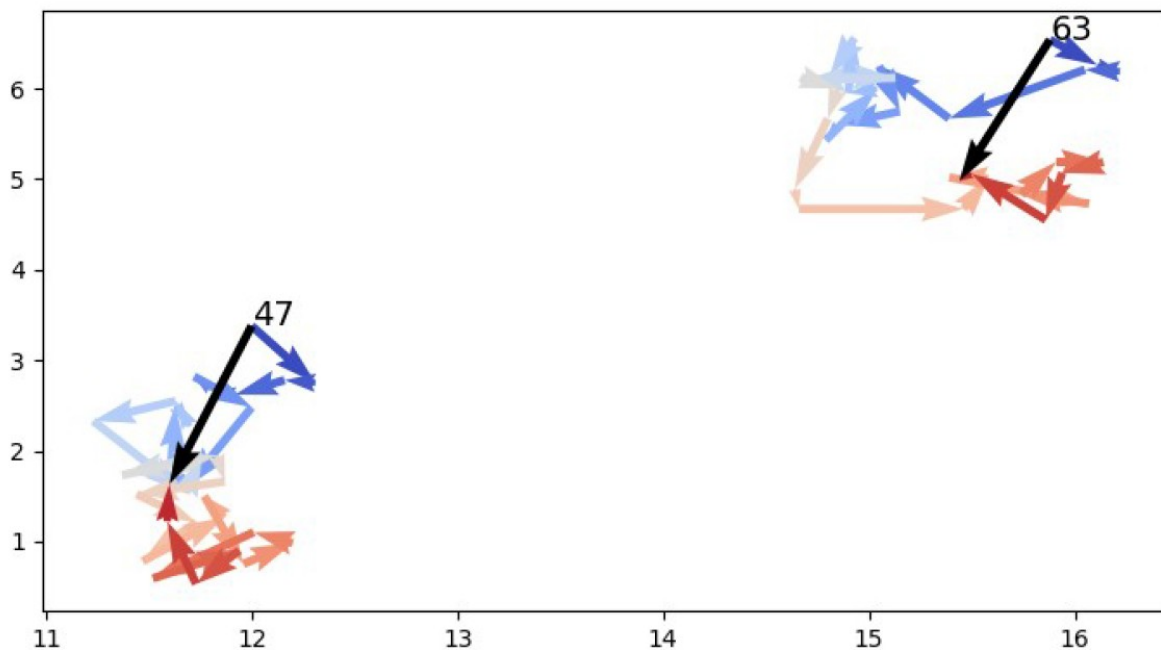


Д.И. Осолодкин: Алгоритм кластеризации движений липидов изложен совершенно непонятно. Не могли бы вы прояснить его?

В.И. Покровский: Алгоритм кластеризации заключается в следующем:

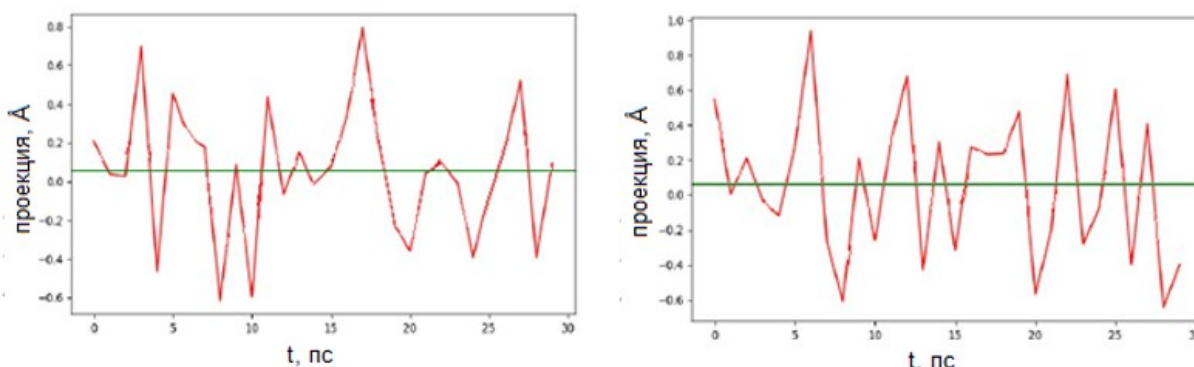
1. Рассмотрим движение молекул липида на плоскости при фиксированном размере временного окна (30 пс на картинке). Цветными стрелками градиентом от синего к красному показано перемещение молекулы за 1 пс. Чёрным цветом показано перемещение для всего рассматриваемого временного промежутка в 30 пс.



Цветными стрелками показаны последовательные вектора перемещения фосфора за время 1 пс. Цвет изменяется в зависимости от времени (переход от тёмно-синего до тёмно-красного). Чёрной стрелкой - перемещение на всём исследуемом временном окне 30 пс. Числа около векторов перемещений - номера липидов. По осям абсцисс и ординат отложены соответствующие координаты атомов.

Для каждого момента времени (1 пс) цветной вектор проецируется на чёрный и получаем значения функции проекции для всех векторов перемещений внутри временного окна фиксированной величины.

Функция проекции для двух рассматриваемых липидов представлена на следующем графике



Красным цветом обозначено значение проекции вектора перемещения липида за 1 пс на вектор общего перемещения (за 30 пс). Слева представлена функция проекции для липида № 63, справа для липида № 47. Зелёным цветом обозначено среднее значение функции проекции.

2. Вычисляем значение коэффициента корреляции Пирсона между функциями проекций векторов перемещений на общее направление при фиксированном временном окне. Получаем попарную

симметричную матрицу с коэффициентами корреляции для всех возможных пар в системе. Значение корреляции характеризует согласованность в перемещениях липидов вдоль направлений своих движений на некотором временном окне.

3. Найдём для всех возможных пар липидов скалярное произведение векторов направлений. Получим также попарную симметричную матрицу. Эти скалярные произведения характеризуют сонаправленность в перемещениях липидов.

4. Подобные матрицы согласованности и сонаправленности рассчитываются для различных размеров временных окон со сдвигом по времени в 1 пс.

5. Для определения кластеров вычисляются параметры отсечки:

для матрицы согласованности выбирается некоторое значение корреляции, например, корреляция > 0.7 ;

для матрицы сонаправленности значение отсечки $> 2 * R^2$, где R — среднее перемещение атомов для исследуемого временного окна на всей траектории МД.

6. Для указанных ограничительных параметров находим в каждый момент времени кластеры согласованно движущихся липидов, при условии, что значения матрицы скалярного произведения и корреляционной матрицы удовлетворяют требованиям пункта 5

Д.И. Осолодкин: Правильно ли я понимаю, что в итоге работы алгоритма выявляется согласованность движения липидов, расположенных в отдалении друг от друга? Есть ли какие-то особенности расстояний между этими липидами?

В.И. Покровский: Да, алгоритм позволяет отследить группы согласованно-движущихся липидов.

Что касается взаимного расположения молекул внутри кластера, то, как правило, они расположены довольно близко друг к другу (то есть являются ближайшими соседями). Но также наблюдаются группы (довольно редкие), двигающиеся согласованно и при этом находясь на значительном удалении. В настоящий момент причины такого поведения не изучены до конца.

Д.И. Осолодкин: На большинстве графиков не подписаны оси. В связи с этим очень сложно понять, какие именно зависимости на них представлены.

В.И. Покровский: Благодарю за замечание. Ряд подписей был добавлен к графикам в ответе на первый вопрос.