

Kai kurie polivalentinių sąveikų aspektai

I.Grinis, F.Ivanauskas, G.Stepanauskas

VU MIF

2014 06 26

- Aplinka – (pilna separabili) metrinė erdvė X , kurioje modeliuojami tam tikrų objektų sąveikos.
- Ligandų kompleksas Lig – sudėtinis objektas, kuris apibūdinamas N_L elementais (taškais) $l_i \in X, i = 1, \dots, N_L$.
- Receptorių kompleksas Rec – sudėtinis objektas, kuris apibūdinamas N_R elementais (taškais) $r_i \in X, i = 1, \dots, N_R$.
- Laikas – parametras, nuo kurio priklauso Lig ir Rec . Paprastai žymimas $t > 0$, $t \in \mathbb{R}$ arba $t \in \mathbb{Z}$.
- Ligandų ir receptorių kompleksai gali sąveikauti.

- Ligandų komplekso taškai charakterizuojami tarpusavyje poriniais atstumais.
- Ligandų komplekso energija E_L – funkcija nuo minėtų atstumų.

- Pvz.:
$$E_L = \sum_{i,j=1, i < j}^{N_L} k_{ij}^L (d(l_i, l_j) - d_{ij}^L)^2$$

- Postuluojuama, kad jeigu kompleksas nesąveikauja su receptorių kompleksu, tai $E_L = 0$.

Receptorių kompleksas

- Receptorių komplekso taškai taip pat charakterizuojami tarpusavyje poriniais atstumais.
- Receptorių komplekso energija E_R – funkcija nuo minėtų atstumų.

- Pvz.:
$$E_R = \sum_{i,j=1, i < j}^{N_R} k_{ij}^R (d(r_i, r_j) - d_{ij}^R)^2$$

- Postuluojama, kad jeigu kompleksas nesąveikauja su receptorių kompleksu, tai $E_R = 0$.

Receptorių ir ligandų sąveika

- Nagrinėjant ligandų ir receptorių kompleksų evoliuciją, t.y. atitinkamų atstumų priklausomybę nuo laiko, svarbu atsižvelgti į galimą jų *sąveiką*, kuri apibūdinama atsirandančiais *ryšiais* tarp atskirų ligandų ir receptorių.
- Receptorių ir ligando kompleksų taškai r_i ir l_j gali sudaryti *ryšį*, jeigu atstumas tarp jų $d(r_i, l_j) \leq R$, kur R – tam tikras teigiamas realus skaičius.
- Minėtas ryšis pasižymi tam tikra *energija* E_s , kuri laikoma mažesne už nulį.
- Jeigu ligandų ir receptorių kompleksai sąveikauja taip, kad tarp jų atsirado K ryšių, tai bendra sąveikos energija yra $E = E_R + E_L + K \times E_s$
- Minėtas skaičius K vadinamas kompleksų ryšio *valentingumu*.

Receptorių ir ligandų sąveika

- Nagrinėjant ligandų ir receptorių kompleksų evoliuciją, t.y. atitinkamų atstumų priklausomybę nuo laiko, svarbu atsižvelgti į galimą jų *sąveiką*, kuri apibūdinama atsirandančiais *ryšiais* tarp atskirų ligandų ir receptorių.
- Receptorių ir ligando kompleksų taškai r_i ir l_j gali sudaryti *ryšį*, jeigu atstumas tarp jų $d(r_i, l_j) \leq R$, kur R – tam tikras teigiamas realus skaičius.
- Minėtas ryšis pasižymi tam tikra *energija* E_s , kuri laikoma mažesne už nulį.
- Jeigu ligandų ir receptorių kompleksai sąveikauja taip, kad tarp jų atsirado K ryšių, tai bendra sąveikos energija yra $E = E_R + E_L + K \times E_s$
- Minėtas skaičius K vadinamas kompleksų ryšio *valentingumu*.

Receptorių ir ligandų sąveika

- Nagrinėjant ligandų ir receptorių kompleksų evoliuciją, t.y. atitinkamų atstumų priklausomybę nuo laiko, svarbu atsižvelgti į galimą jų *sąveiką*, kuri apibūdinama atsirandančiais *ryšiais* tarp atskirų ligandų ir receptorių.
- Receptorių ir ligando kompleksų taškai r_i ir l_j gali sudaryti *ryšį*, jeigu atstumas tarp jų $d(r_i, l_j) \leq R$, kur R – tam tikras teigiamas realus skaičius.

Receptorių ir ligandų sąveika

- Minėtas ryšis pasižymi tam tikra *energija* E_s , kuri laikoma mažesne už nulį, ir *atstumu* d_s tarp r_i ir l_j , kuris tampa pastovus tol, kol ryšis egzistuoja.
- $d_s \leq R$.
- **Pastaba.** Kaip taisykle po ryšio atsiradimo E_L ir E_R padidėja.
- Jeigu ligandų ir receptorių kompleksai sąveikauja taip, kad tarp jų atsirado K ryšių, tai bendra sąveikos energija yra $E = E_R + E_L + K \times E_s$
- Minėtas skaičius K vadinamas kompleksų ryšio *valentingumu*.

- Duotiems *Lig* ir *Rec* kompleksams ir žinomiems atstumams $d(r_i, l_j)$ rasti valentingumą, kuriam esant bendra sąveikos energija minimali.

- Apsiribokime tuo atveju, kai Lig ir Rec kompleksai yra vienetiniame rutulyje, t.y. egzistuoja $x_0 \in X$ toks, kad $d(l_i, x_0) \leq 1, 1 \leq i \leq N_L$ ir $d(r_i, x_0) \leq 1, 1 \leq i \leq N_R$
- Modeliavimui pasirinkime $X = C[0, 1]$, nes ši erdvė yra „universali“.
- ... tada galime nagrinėti tą atvejį, kai $x_0 \equiv 0$.

- Mes nagrinėjome kai kuriuos polivalentinių sąveikų modeliavimo panaudojant metrinės erdvės terminologiją aspektus.
- Atlikti statistiniai skaičiavimai parodo, kad kai kurie erdvės $C[0,1]$ poaibiai gali potencialiai reprezentuoti tam tikras realias molekulinės biologijos sistemų objektus.