

ВЫБОРКА ПО ЗНАЧИМОСТИ ПРИ ГЕНЕРИРОВАНИИ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА КОНФОРМАЦИЙ ЦЕПНЫХ МОЛЕКУЛ (МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО)

¹Журкин Д.В., ²Рабинович А.Л.

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования “Петрозаводский государственный университет”, г. Петрозаводск

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук, г. Петрозаводск

¹Журкин Д.В.
²Рабинович А.Л.
¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования “Петрозаводский государственный университет”
²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук

Метод Монте-Карло (МК) [1] для вычисления интегралов в фазовом пространстве (в пространстве состояний, конформаций, конфигураций) состоит в получении большого числа реализаций случайного процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами рассматриваемых интегралов.

В настоящей работе описан алгоритм моделирования молекул цепного строения методом МК в предположении о непрерывном спектре конформаций, с использованием процедуры выборки по значимости. Алгоритм применен к изучению углеводородных цепей различного строения. Конформация цепной молекулы однозначно определяется внутренними переменными: валентными связями l , валентными углами θ , торсионными углами φ . Генерирование конформаций проводили в 2 этапа. На 1-м этапе все величины l и θ фиксировали при равновесных значениях, а конформацию генерировали только по углам φ в полном диапазоне изменения каждого из них от 0 до 2π . При этом использовали выборку по значимости согласно энергии ближних взаимодействий U_{short} , которую вычисляли с учетом лишь торсионной энергии, энергии невалентных взаимодействий и электростатической энергии поля CHARMM27 (с поправками согласно работе [2]). Предложен алгоритм расчета энергии U_{short} как суммы энергий U_m фрагментов цепи, когда каждый фрагмент содержит 3 последовательных угла внутреннего вращения вокруг связей основной цепи, $\varphi_i, \varphi_{i+1}, \varphi_{i+2}$, варьирование которых приводит к изменению взаимных положений атомов.

На 2-м этапе осуществляли переход в полученной конформации от внутренних переменных к декартовым координатам всех атомов, производили небольшие смещения каждого атома, случайные по трем осям (X,Y,Z), и вычисляли новые значения внутренних переменных. Такой подход позволял достигнуть обобщенного варьирования всех валентных связей и валентных углов, а торсионные углы претерпевали лишь дополнительные изменения в небольших пределах относительно значений, разыгранных на 1-м этапе. В итоге вычисляли энергию молекулы с учетом всех компонентов поля CHARMM27 и текущие значения искомого наблюдаемых величин N . Вычисление средних характеристик $\langle N \rangle$ цепи проводили для двух разных состояний - в хорошем растворителе (с учетом эффектов исключенного объема) и в Θ -условиях. Развитый подход позволяет проводить сравнение между собой данных, полученных в рамках метода МК и метода молекулярной динамики при одних и тех же условиях и параметрах силовых полей, - в частности, поля CHARMM27, которое широко используется в расчетах свойств липидных систем методом молекулярной динамики. Расчеты для конкретных цепных молекул проведены на кластере КарНЦ РАН.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-1642.2012.4.

Литература

1. Рабинович А.Л., Иванов В.А. Обзор методов компьютерного моделирования молекулярных систем: метод Монте-Карло // В кн.: Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.Р. Хохлов. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”. 2009. С.63-119.

2. *Högberg C.-J., Nikitin A.M., Lyubartsev A.P.* Modification of the CHARMM Force Field for DMPC Lipid Bilayer // *J. Comput. Chem.* 2008. V.29. No.14. P.2359-2369.