

ОПТИМИЗАЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ ПИГМЕНТОВ И ПИГМЕНТ-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ С ПОМОЩЬЮ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ

Р. Ю. Пищальников

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской Академии Наук, Москва, Россия

Исследование первичных процессов фотосинтеза непосредственным образом связано с численным моделированием оптических свойств пигмент-белковых комплексов (ПБК), входящих в состав клеточных мембран фотосинтезирующих организмов. Перенос энергии, как в рамках отдельного ПБК, так и между комплексами определяется не только индивидуальными характеристиками пигментов и ближайшим белковым окружением, но и их взаимном расположении в комплексе. Использование полуклассических квантовых теорий для расчёта оптического отклика ПБК позволяет связать воедино особенности возбужденных электронных состояний фотосинтетические пигментов, структуру комплексов, а также специфику экспериментальных методов измерения линейного и нелинейного оптического отклика. Однако, как показывает практика, корректное использование математического аппарата полуклассических квантовых теорий при моделировании первичных процессов фотосинтеза приводит к задачам с большим количеством свободных параметров. Таким образом, при расчёте оптического отклика всегда встаёт вопрос о статистической значимости и единственности найденных параметров квантовой модели, обеспечивающих приемлемое совпадение экспериментальных и расчётных спектров или кинетик. Одним из возможных путей решения данной проблемы является использование оптимизационных алгоритмов для оценки качества подгонки экспериментальных данных. Наличие современных высокопроизводительных ресурсов позволяет применять эвристические эволюционные алгоритмы, которые сейчас активно используются в прикладных задачах математического моделирования физических сред. Нами была разработана и успешно опробована методология моделирования линейного и нелинейного оптического отклика как для мономерных пигментов в растворителях [1, 2], так и для ПБК [3] с помощью алгоритма дифференциальной эволюции.

Библиографические ссылки

1. Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling / D. D. Chesalin [et al.] // *Swarm and Evolutionary Computation*. 2022. Vol. 75. P. 101210.
2. The role of the local environment on the structural heterogeneity of carotenoid β -ionone rings / R. Y. Pishchalnikov [et al.] // *Photosynthesis Research*. 2023. Vol. 156. iss. 1. P. 3–17.
3. Monte carlo simulation affects convergence of differential evolution: a case of optical response modeling / D. D. Chesalin [et al.] // *Algorithms*. 2023. Vol. 16, iss. 1. P. 3.