5. *Troyanskaya O., Cantor M., Sherlock G., Brown P., Hastie T., Tibshirani R., Botstein D., Altman R.B.* Missing value estimation methods for dna microarrays // Bioinformatics. 2001. №16. С. 520–525.
6. *Tusher V., Tibshirani R., Chu G.* Significance analysis of microarrays applied to transcriptional responses to ionizing radiation // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2001. №98. С.5116–5121.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ НА БАЗЕ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕРНЕ-ПЕЧУКАСА

Н. Н. Сидоревич, В. М. Лутковский

ВВЕДЕНИЕ

Метод молекулярной динамики (МД), будучи одним из наиболее распространенных методов компьютерного моделирования молекулярных систем, имеет широкое применение в различных областях науки и техники. Однако, несмотря на гибкость и универсальность этого метода, его практическое применение ограничивается возможностями вычислительной техники и программных средств. Метод МД позволяет моделировать системы с довольно небольшим количеством частиц (до нескольких тысяч), в то время как в реальных системах их число достигает 10^{23} [1–5]. Одним из недостатков известных программных средств, основанных на реализации этого метода, является отсутствие возможности отображения результатов моделирования.

В данной работе рассмотрена реализация метода молекулярной динамики применительно к системе многоатомных молекул с использованием потенциала Берне-Печукаса (Berne-Pechukas) [6] с возможностью визуализации текущего состояния системы в различные моменты времени. Для визуализации результатов моделирования использована программная библиотека OpenGL [7].

АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В качестве исходной модели рассматривается система взаимодействующих частиц, для которой выполняются законы Ньютона и закон сохранения импульса, причем сила взаимодействия любых двух молекул зависит только от расстояния между ними. В этом случае потенциальная энергия U определяется только суммой двухчастичных взаимодействий [2]:

$$U = V(r_{12}) + V(r_{13}) + \ldots + V(r_{23}) + \ldots = \sum_{i<j=1}^{N} V(r_{ij})$$

где r_{ij} – расстояние между молекулами i и j, N – полное количество молекул в рассматриваемом объеме.

Для реализации метода МД использован алгоритм Верле в скоростной форме [1–2] для линейных и угловых скоростей. При этом в отличие от потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса, описывающего взаимодействие сферических молекул, в данной работе рассмотрен более общий случай.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Для несферических частиц необходимо вводить зависимость взаимодействия от ориентации молекул в пространстве. Потенциальную энергию такого взаимодействия можно представить в виде суммы всевозможных парных взаимодействий концов молекул [2–4]:

$$U(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)=\sum_a\sum_b V_{ab}(r_{ab}) \tag{1}$$

где $\vec{\Omega}_i$ и $\vec{\Omega}_j$ – вектора, определяющие ориентацию молекул в пространстве, $r_{ab}=\left|\vec{r}_{ia}-\vec{r}_{jb}\right|$.

Для классической динамики системы в качестве потенциала взаимодействия в рамках данной работы использован Берне-Печукаса (Berne-Pechukas), являющийся обобщением потенциала Леннарда-Джонса на более сложные взаимодействия [2, 6]:

$$V^{BP}(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)=4\varepsilon(\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)\left[\left(\frac{\sigma(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)}{r_{ij}}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{2}$$

где $\varepsilon(\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)$ – энергетический параметр, $\sigma(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)$ – параметр длины, которые представляются в виде:

$$\varepsilon(\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)=\varepsilon_0\left[1-\chi^2(\vec{e}_i\cdot\vec{e}_j)^2\right]^{-1/2} \tag{3}$$

$$\sigma(\vec{r}_{ij},\vec{\Omega}_i,\vec{\Omega}_j)=\sigma_0\left[1-\frac{\chi}{2}\left\{\frac{(\vec{r}_{ij}\cdot\vec{e}_i+\vec{r}_{ij}\cdot\vec{e}_j)^2}{r_{ij}^2\left(1+\chi(\vec{e}_i\cdot\vec{e}_j)\right)}+\frac{(\vec{r}_{ij}\cdot\vec{e}_i-\vec{r}_{ij}\cdot\vec{e}_j)^2}{r_{ij}^2\left(1-\chi(\vec{e}_i\cdot\vec{e}_j)\right)}\right\}\right]^{-1/2} \tag{4}$$

Параметр анизотропии χ характеризует форму молекулы и может быть записан следующим образом:

$$\chi=\frac{(l/d)^2-1}{(l/d)^2+1} \tag{5}$$

где l – длина, d – ширина молекулы.

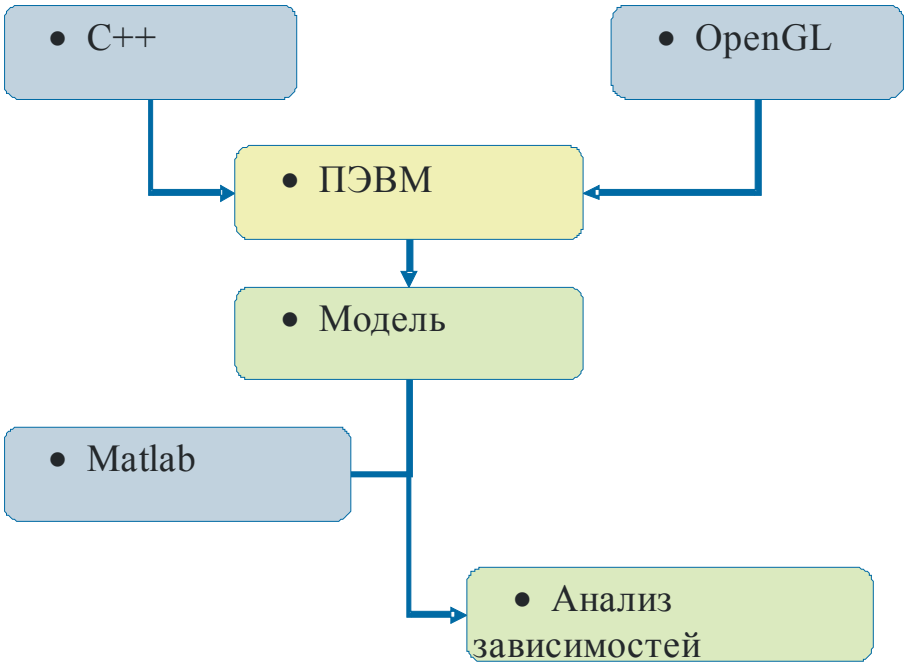

Рис. 1. Структурная схема программного комплекса

Из приведенных соотношений видно, что при $l = d$ (шароподобные молекулы) потенциал Berne-Pechukas вырождается в потенциал Леннарда-Джонса. Следует отметить, что вследствие аддитивности потенциальной энергии, потенциал взаимодействия можно варьировать для изучения колебаний атомов и других типов взаимодействий (связанных, угловых, кулоновских).

Выражения (1–5) использованы при разработке алгоритма моделирования динамики системы молекул вытянутой формы.

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Для реализации алгоритма моделирования молекулярной системы использован язык C++, для визуализации результатов моделирования – программная библиотека OpenGL, для обработки результатов и построения зависимостей – система Matlab (рис.1).

Результаты моделирования тестировались для случая сред аргона и кислорода посредством контроля постоянства полной энергии моделируемой многочастичной системы и ее температуры. Обнаружилась существенная зависимость сходимости численного алгоритма от концентрации частиц в ячейке моделирования, начальных скоростей частиц и шага интегрирования.

Разработанный программный комплекс легко развиваем как в плане моделирования сред других двухатомных газов, так и в плане моделируемой многочастичной системы и ее температуры. Обнаружилась су-

щественная зависимость сходимости численного алгоритма от концентрации частиц в ячейке моделирования, начальных скоростей частиц и шага интегрирования.

Разработанный программный комплекс легко развиваем как в плане моделирования сред других двухатомных газов, так и в плане моделирования более сложных систем, состоящих из многоатомных молекул. Также можно модифицировать программу для моделирования жидкокристаллических сред. В качестве перспективы развития этого комплекса можно выделить адаптацию алгоритма под распределенные вычисления. Это позволит существенно повысить производительность алгоритма, увеличить количество моделируемых частиц.

Авторы выражают благодарность М.В. Якутовичу за полезные обсуждения и предоставленную информацию.

Литература

1. *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике, М., 1990.
2. *Rapaport D.C.* The art of molecular dynamics simulation, Cambridge, 2004.
3. *Лисица Е.В.* Особенности реализации метода молекулярной динамики //Тез. докл. XVI Респ. науч. конф. асп., магистрантов и студ. «Физика конденсированного состояния», 23 – 25 апреля 2008 г. Гродно, Республика Беларусь.С.69 – 70.
4. *Лисица Е.В*. Моделирование идеальной жидкости методом молекулярной динамики // Сб. работ 65-й научной конференции студентов и аспирантов БГУ. В 3 ч. Ч. 1. Минск: Изд. Цент БГУ, 2008. С.176–179.
5. *Жишко Ю.П., Асташкин А.В., Лисица Е.В., Лутковский В.М.* Программные средства для реализации метода молекулярной динамики //Сб. работ 66-й научной конференции студентов и аспирантов БГУ. В 3 ч. Ч. 1. Минск: Изд. Цент БГУ, *2010.С.202–205.*
6. *Care C.M., Cleaver D.J.* Computer simulation of liquid crystals // Rep. Prog. Phys., 2005. V. 68. PP. 2665–2700.
7. *Райт Р., Липчак Б.* OpenGL. Суперкнига, 3-е издание // пер. с англ. М., Вильямс, 2006.

РАЗРАБОТКА ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ПОЛИМЕРЗЦИИ АКТИНА ДЛЯ ИНТЕРПРИТАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ВОССТАНОВЛЕНИЮ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПОСЛЕ ФОТООБСЦВЕЧИВАНИЯ

С. А. Рак

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных биологических процессов, влияющих на движение и деление раковых клеток, является полимеризация актина – белка,