

**АВТОМАТИЗИРОВАННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ДИНАМИКИ ПОЛИМЕРНЫХ МОЛЕКУЛ С  
АВТОМАТИЧЕСКИМ ВЫВОДОМ УРАВНЕНИЙ  
ДВИЖЕНИЯ В ФОРМЕ ЛАГРАНЖА**

**Кольцов Д.А., Потемкин С.Б., Грачёв Е.А.**

(Москва)

Основные идеи, которые предлагаются в рамках нового метода проведения численного эксперимента по моделированию динамики макромолекул: рассмотрение системы макромолекул как единой механической системы; представление структурной части математической модели механической системы в виде графа и анализ изменений топологии графа во времени; использование обобщенных координат для описания динамики системы; автоматический вывод уравнений системы и их динамическое изменение.

**AUTOMATED MODELING OF DYNAMICS POLYMERIC  
MOLECULES WITH AUTOMATIC OUTPUT OF THE  
EQUATIONS IN LAGRANGE FORM**

**Koltsov D.A., Potemkin S.B., Grachev E.A.**

(Moscow)

The main ideas offered within the framework of a new method for realization of numerical experiment on modeling of the macromolecule dynamics are as follows: consideration of a macromolecule system as a uniform mechanical system, representation of a structural part of mathematical model of mechanical system as a graph and analysis of changes in the graph topology in time, use of the generalized coordinates for the description of the system dynamics, automatic output of the equations describing the system and their dynamic change.

Макромолекулу можно охарактеризовать как набор массив-

ных звеньев, кинематических пар и других элементов, то есть рассматривать как некий пространственный механизм. В предлагаемом подходе производится декомпозиция механической системы на группы элементов:

- недеформируемые элементы; обладают только кинетической энергией, это есть инерционная часть механической системы, описывается с помощью графа, который в ходе моделирования динамически изменяется. Кинематические пары не имеют размеров и характеризуются только величиной и направлением перемещения в них.
- элементы, которые являются источниками сил (межатомные и межмолекулярные связи, моделируемые как пружины, демпферы, внешние поля), не обладают кинетической энергией (неинерционная часть);
- распределенные элементы; обладают как кинетической, так и потенциальной энергией.

Обозначения для графа системы:	
$\text{II} \text{---} \diamond \text{---} \text{II}$	$\text{I2}$ – массивное звено;
$\text{II} \text{---} \text{---} \text{II}$	$\text{I2}$ – рычаг;
$\text{II} \text{---} \square \text{---} \text{II}$	$\text{I2}$ – поступательная,
$\text{II} \text{---} \bigcirc \text{---} \text{II}$	$\text{I2}$ – вращательная
$\text{II} \text{---} \odot \text{---} \text{II}$	$\text{I2}$ – шаровая пары.

Построенный граф инвариантен относительно масштаба изображения системы.

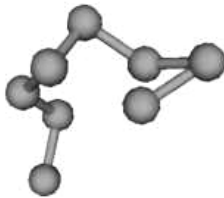


Рис. 1. Пример линейной свободно сочлененной молекулы с  $N=8$  звеньями.

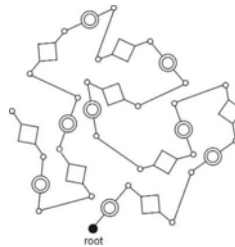


Рис. 2. Граф, соответствующий линейной свободно сочлененной молекуле с  $N=8$  звеньями.

Для описания движения системы в отсутствие внешних сил необходимо также задать количественно физические характеристики для вершин и ветвей графа.

**Этап формирования уравнений движения.** Рассмотрим

процедуру получения уравнений динамики, на примере одной линейной свободно сочлененной молекулы как части всей подсистемы (рис.1). Рассмотрение такого случая является основополагающим, поскольку, алгоритм легко адаптируем для более общих случаев.

Граф механической системы для линейной свободно сочлененной молекулы представляется цепью, типа изображенной на рис. 2, и состоит из набора массивных звеньев и кинематических пар типа “рычаг” и шаровая пара.

Здесь решались две основные подзадачи:

1. проблема автоматического формирования уравнений движения для рассматриваемой молекулы в соответствии с её графом;
2. выбор метода описания динамики наиболее сложного типа кинематической пары – шаровой.

В качестве координат, описывающих пространственное вращение, были выбраны углы Эйлера (рис.3.).

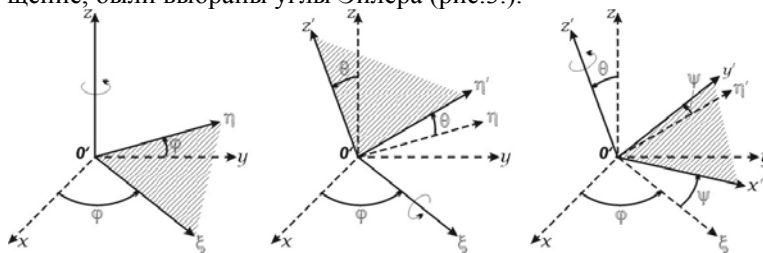


Рис. 3. Углы Эйлера  $\varphi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$ .

В указанных координатах модель макромолекулы представлена на рис. 4.

Зададим матрицы  $G_k$ , определяющие положение каждой системы координат  $S_{(k)}$ , связанной с  $k$ -м массивным звеном:

$$G_k = \begin{bmatrix} \cos\varphi_k \cos\psi_k - \sin\varphi_k \cos\theta_k \sin\psi_k & -\cos\varphi_k \sin\psi_k - \sin\varphi_k \cos\theta_k \cos\psi_k & \sin\varphi_k \sin\theta_k \\ \sin\varphi_k \cos\psi_k + \cos\varphi_k \cos\theta_k \sin\psi_k & -\sin\varphi_k \sin\psi_k + \cos\varphi_k \cos\theta_k \cos\psi_k & -\cos\varphi_k \sin\theta_k \\ \sin\theta_k \sin\psi_k & \sin\theta_k \cos\psi_k & \cos\theta_k \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$G_k^T = \begin{bmatrix} \cos\varphi_k \cos\psi_k - \sin\varphi_k \cos\theta_k \sin\psi_k & \sin\varphi_k \cos\psi_k + \cos\varphi_k \cos\theta_k \sin\psi_k & \sin\theta_k \sin\psi_k \\ -\cos\varphi_k \sin\psi_k - \sin\varphi_k \cos\theta_k \cos\psi_k & -\sin\varphi_k \sin\psi_k + \cos\varphi_k \cos\theta_k \cos\psi_k & \sin\theta_k \cos\psi_k \\ \sin\varphi_k \sin\theta_k & -\cos\varphi_k \sin\theta_k & \cos\theta_k \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\vec{\rho}_k = G_k^T (\vec{r}_{k+1} - \vec{r}_k), \quad k = 1, \dots, N-1. \quad (3)$$

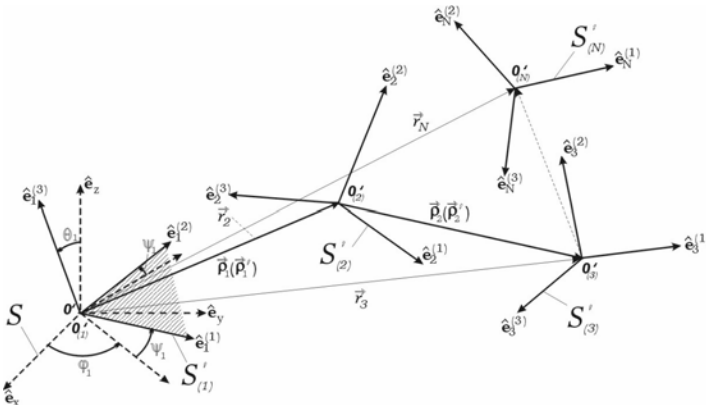


Рис. 4. Модель механической системы, соответствующей линейной свободно сочлененной макромолекуле

Задав матрицы  $G_k$ , можно однозначно определить положение каждого массивного звена в абсолютном пространстве:

$$\vec{r}_a = \sum_{k=1}^{a-1} G_k \vec{\rho}_k, \quad a = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Соответствующие уравнения Лагранжа, описывающие систему  $N$  тел:

$$\sum_{a=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \dot{\varphi}_l} - \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \varphi_l} \right\} = Q_l^{(1)},$$

$$\sum_{a=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \dot{\theta}_l} - \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \theta_l} \right\} = Q_l^{(2)},$$

$$\sum_{a=1}^N \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \dot{\psi}_l} - \frac{\partial(w_{an} + w_{ae})}{\partial \psi_l} \right\} = Q_l^{(3)},$$
(5)

где кинетическая энергия поступательного движения твердого тела  $w_{an}$  представляется формулой:

$$w_{an} = \frac{1}{2} m_a (\dot{\vec{r}}_a, \dot{\vec{r}}_a), \text{ где } \dot{\vec{r}}_a = \sum_{k=1}^{a-1} \dot{G}_k \dot{P}_k$$
(6)

а кинетическая энергия вращательного движения твердого тела  $w_{ae}$  представляется формулами:

$$w_{ae} = \frac{1}{2} ([I_a] \dot{\omega}_a, \dot{\omega}_a),$$
(7)

$$\omega_a^{(1)} = \dot{\varphi}_a \sin \theta_a \sin \psi_a + \dot{\theta}_a \cos \psi_a$$

$$\omega_a^{(2)} = \dot{\varphi}_a \sin \theta_a \cos \psi_a - \dot{\theta}_a \sin \psi_a.$$
(8)

$$\omega_a^{(3)} = \dot{\varphi}_a \cos \theta_a + \dot{\psi}_a$$

После соответствующего дифференцирования и группировки в левой части членов, содержащих обобщенные ускорения, получим уравнения движения:

$$[a_{lj}(q, t)] \left\{ \ddot{q}_j \right\} = \left\{ b_l(q, q, t) \right\}$$
(9)

которые можно записать в матричном виде  $A \ddot{q} = B$ , или поэлементно:



ных скоростей, а затем по значениям этих скоростей, опять же с помощью метода Рунге-Кутты, находятся значения обобщенных координат.

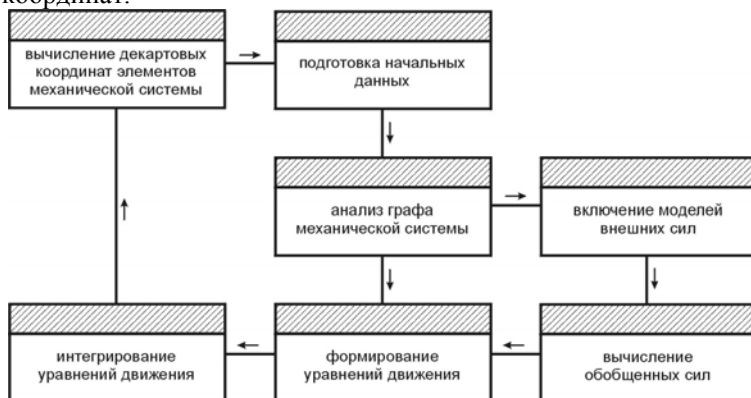


Рис. 5. Общая схема алгоритма.

Общая схема алгоритма работы системы моделирования представлена на рис.5.

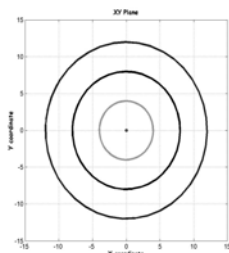
На основе полученных теоретических результатов реализовано моделирование ряда тестовых задач для линейной свободной сочлененной молекулы.

**Тест “нулевые скорости”.** Здесь и в последующих тестах звенья молекулы считались одинаковыми (т.е. рассматривался гомополимер): массы звеньев одинаковы и равны  $m_a=1$ , а тензоры инерции определяются из расчета, что звенья являются твердыми шарами радиуса 1; длины рычагов, соответствующих валентным связям в молекуле, равны 4.

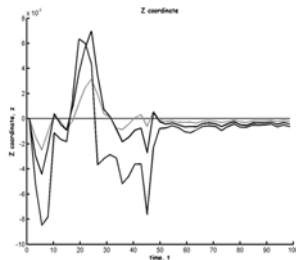
В тесте в качестве начальных значений для скоростей массивных звеньев макромолекулы на вход алгоритма подаются нули; тест является проверкой корректности схемы; система, соответствующая молекуле с такими начальными условиями имеет нулевую кинетическую энергию и не должна осуществлять движение, что подтвердил вычислительный эксперимент.

**Тест “часы”.** Начальные условия: молекула имеет вытянутую в линию фигуру, расположенную в плоскости  $XU$  абсолютной системы координат; звенья молекулы имеют одинаковые начальные обобщенные (угловые) скорости, причем заданные

таким образом, что вектора угловых скоростей сонаправлены с осью  $OZ$  абсолютной системы координат и равны.



**Рис. 6. а.** Траектории движения звеньев молекулы в проекции на плоскость  $XY$  для теста “часы”.



**Рис. 6. б.** Зависимость координаты  $Z$  от времени для каждого из звеньев молекулы в тесте “часы”.

При таких начальных условиях система должна совершать вращательное движение в плоскости  $XY$ , напоминающее движение стрелки часов. Проведенный вычислительный эксперимент дал следующие результаты (рис. 6 а - в).

Из графиков видно, что, несмотря на то, что каждое звено имеет все степени свободы, соответствующие пространственной шаровой паре, элементы системы практически не выходят из плоскости  $XY$  (отклонение составляет меньше 0.1% от характерного масштаба системы).

При этом форма молекулы в целом сохраняется; система совершает малые колебательные движения в плоскости  $XY$  и вращательные движения (по “азимутальному” углу) вдоль оси рычагов.

**Тест “змейка”.** Начальные условия: молекула содержит восемь звеньев и имеет форму русской буквы “С”; первое звено имеет начальную обобщенную скорость, соответствующую обобщенной координате  $\varphi_1$ , т.е. вектор угловой скорости направлен вдоль оси  $OZ$ ; остальные скорости равны нулю.

При таких начальных условиях система должна в целом совершать вращательное движение в плоскости  $XY$  и при этом вдоль молекулы должна идти своеобразная “волна”, напоминающая извивающиеся движения змеи при ее перемещении по поверхности.



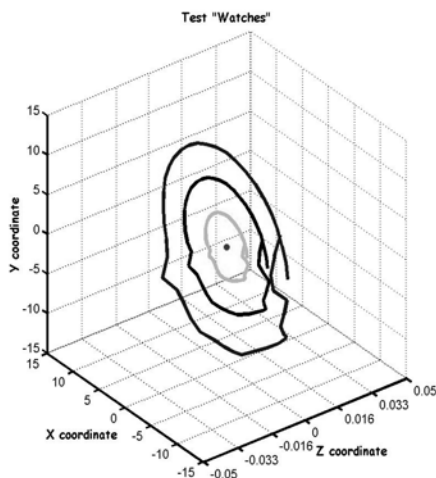


Рис. 6, в. Пространственные траектории движения звеньев молекулы для теста “часы”.

Результаты вычислительного эксперимента представлены на рис. 7.

Как видно, волна действительно наблюдается, что подтверждает адекватное поведение построенной модели, соответствующее физической интуиции.

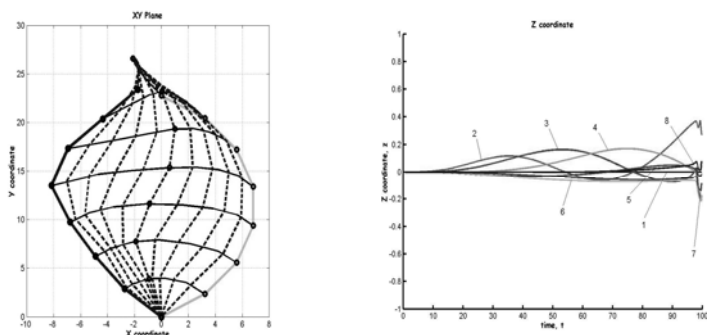
Далее, при больших временах счета не наблюдается “развала” вычислительного процесса в системе.

Механическая система продолжает осуществлять движение, практически не выходя из плоскости  $XU$ .

Однако, как видно из сравнения с предыдущим тестом, уже начинают проявляться эффекты, связанные с разномасштабностью протекающих процессов во всей системе, что отражается на точности работы схемы интегрирования и, как следствие, на отклонениях от плоскости  $XU$ .

Работа по повышению качества интегрирования уравнений движения авторами будет продолжена.

Вместе с тем, помимо аспектов, которые уже обсуждались, необходимо также отметить, что в реальных условиях “разогрев” системы, как правило, компенсируется имеющимся в системе “трением”.



- а. Траектории движения звеньев в проекции на плоскость XY.      б. Зависимость координат Z звеньев от времени в тесте “змейка”.

Рис. 7. Траектории движения молекулы для теста “змейка”.

Следует ожидать, что при моделировании систем, в которых присутствует “трение” (типичная ситуация для макромолекул, динамика которых, как правило, рассматривается в более или менее вязкой среде окружающих малых молекул), предлагаемая схема вычислений будет вести себя ещё более устойчиво.

### Литература.

1. Ольховский И.И. //Курс теоретической механики для физиков, Изд. МГУ, 74.
2. Лурье А. И. //Аналитическая механика, Физматгиз, М., 61.
3. Харари Ф. //Теория графов, М., Мир, 73.
4. А.Ю. Гросберг, А.Р. Хохлов //Статистическая физика макромолекул, М., Наука, 89.
5. М. Дой, С. Эдвардс //Динамическая теория полимеров. М. Мир, 98.
6. К. Binder //Monte-Carlo and Molecular dynamics simulation in polymer science, Oxford University Press, 95.
7. А.Р. Хохлов, С.И. Кучанов //Лекции по физической химии полимеров, М., Мир, 2000.