

АЛГОРИТМЫ РАЗРЕШЕНИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ В МЕТОДЕ МНОГОЧАСТИЧНОЙ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Хрущев С.С., Устинин Д.М., Федоров В.А., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т,
каф. биофизики, styx@biophys.msu.ru

Метод многочастичной броуновской динамики [1] используется для моделирования взаимодействия белков с учетом сложного интерьера субклеточных компартментов. Этот метод позволяет корректно воссоздать процесс диффузионного сближения макромолекул с учетом их электростатических взаимодействий, однако для моделирования процессов при тесном контакте молекул, необходимо «переключаться» на более детальные методы моделирования [2] либо использовать эмпирические параметры. В методе броуновской динамики широко применяется метод исключенного объема [3]. Исключенный объем молекулы соответствует области пространства, находящейся «внутри» молекулы. Если движение молекул приводит к взаимопересечению двух исключенных объемов, это рассматривается как их «столкновение» молекул (коллизия).

В программном комплексе ProKSim [4] реализованы последовательный и параллельный стохастический алгоритмы разрешения коллизий. Исключенный объем каждой молекулы моделируется как набор шаров (атомов). В первом случае перемещение молекул в реакционном объеме осуществляется последовательно, и при возникновении коллизии смещение уменьшается до тех пор, пока коллизия не будет устранена. Это соответствует столкновению неупругих твердых тел. При использовании стохастического алгоритма расчет новых положений производится одновременно для всех молекул; расчет повторяется до тех пор, пока случайным образом не будет найдено положение молекул, при котором никакие исключенные объемы не пересекаются. Для ускорения вычислений повторный расчет положений производится только для тех молекул, для которых на предыдущей итерации было определено пересечение исключенных объемов. Для ускорения расчетов может использоваться технология NVIDIA CUDA; при вычислениях с использованием только центрального процессора используется технология OpenMP.

Работа поддержана грантами РФФИ 12-07-33036-мол_a_вед и 12-04-31839-мол_a. Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ.

Литература.

1. Kovalenko I.B., Abaturova A.M., Gromov P.A., Ustinin D.M., Grachev E.A., Rznichenko G.Y., Rubin A.B. Direct simulation of plastocyanin and cytochrome f interactions in solution // *Phys. Biol.* 2006. Т. 3. С. 121–129.
2. Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б. Молекулярное моделирование процесса образования комплекса белков пластоцианина и цитохрома f // в наст. сб.
3. Northrup S.H., Allison S.A., McCammon J.A. Brownian dynamics simulation of diffusion-influenced bimolecular reactions // *J. Chem. Phys.* 1984. Т. 80. № 4. С. 1517–1524.
4. Хрущев С.С., Абатурова А.М., Дьяконова А.Н., Устинин Д.М., Зленко Д.В., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim // *Компьютерные исследования и моделирование.* 2013. Т. 5. № 1. С. 47–64.