

АНАЛИЗАТОР ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ

Лихачев И.В., Балабаев Н.К.

Институт математических проблем биологии РАН,
Россия, 142290, Московская область, г. Пущино, ул. Институтская, 4

Методом моделирования молекулярной динамики пользуются во многих научно-исследовательских лабораториях. Подготовка новых квалифицированных кадров в области молекулярного моделирования стала приоритетной задачей для многих научно-исследовательских учреждений и высших учебных заведений, в том числе, осуществляющих послевузовское профессиональное образование.

Разработанная нами программа TAMD (Trajectory analyzer of molecular dynamics, Анализатор траекторий молекулярной динамики, далее по тексту Анализатор) в первую очередь направлена на проведение быстрого анализа траекторий молекулярной динамики. Анализатор содержит стандартные средства показа молекулярного кино и поддерживает современные технологии ускорения вывода трехмерной графики. В программе присутствуют средства для вычисления и анализа временных зависимостей ряда величин вдоль траектории.

Реализовано построение расширенных динамических контактных карт и лент контактов. Особенность Анализатора заключается в предоставлении возможности одновременного анализа как статических, так и динамических структур. Представлен алгоритм построения единой матрицы по всей траектории молекулярно-динамической системы, так называемой ленты контактов. Данная структура способна быстро и наглядно изобразить динамические процессы, происходящие в системе.

Представлена и реализована новая характеристика – коэффициент вариации. Он дает качественное представление о процессе структурных изменений в молекулярной системе, позволяет быстро находить временные участки структурных изменений макромолекул, а также атомы, вовлеченные в эти изменения.

Все заявленные характеристики способны применяться одновременно к исследуемому объекту. Вместе с характеристиками постоянно доступен сам исследуемый объект в виде различных способов его визуального анимированного представления. За счет достигнутого уровня интерактивности внедрение TAMD в учебный процесс позволяет студентам более легко и глубоко понимать поведение сложных молекулярных систем, осваивая искусство молекулярного моделирования.

Литература

1. *Лихачев И.В., Балабаев Н.К.* Анализатор траекторий молекулярной динамики. – Математическая биология и биоинформатика, 2007, том 2, №1, с.120-129.
2. *Лихачев И.В., Балабаев Н.К.* Построение расширенных динамических контактных карт по данным молекулярно-динамических расчетов. – Математическая биология и биоинформатика. 2009. Т. 4. № 1. С. 36-45.