

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЧЕТВЕРТОГО ИЗМЕРЕНИЯ В РАСЧЕТАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ВСТАВКИ РАСТВОРИТЕЛЯ В МОЛЕКУЛУ ДНК

Лихачев И.В.

ИМПБ РАН – филиал ПИМ им. М.В. Келдыша РАН, Россия, 142290, Московская область, г. Пущино, ул. проф. Виткевича, д.1, ИМПБ РАН, ilya_lihachev@mail.ru

В представленной работе четвертое измерение понимается в декартовом смысле. Речь не идёт о существовании четвёртого измерения в природе. В молекулярной динамике четвертое измерение – это математическая абстракция, которая вводится в тех случаях, когда тремя измерениями сложно достичь определённого эффекта.

Под четырёхмерной молекулярной динамикой подразумевают как полноценную динамику по всем четырём измерениям, там и ньютоновское движение по трем измерениям с движением по заданному закону в четвертом измерении.

Задача состоит в конструировании системы, состоящий из молекулы ДНК с несколькими молекулами воды, лежащих на прямой, проходящей между двумя спиральями ДНК. Необходимо добиться минимального расстояния между цепями ДНК, чтобы между ними могла находиться ровно одна молекула воды.

В данной работе представлено использование четырёхмерной молекулярной динамики для выбранной подсистемы. В качестве подсистемы, находящейся в четвертом измерении, будут выступать молекулы растворителя (5 молекул воды).

Предположим, что все атомы основной системы имеют четырёхмерные координаты $(x_i, y_i, z_i, 0)$, где $i=1..N$, N – число атомов основной системы. Тогда начальные позиции растворителя имеют координаты (x_j, y_j, z_j, s) , где $i=1..M$, M – число атомов подсистемы, s – четвертая координата (равная для всех атомов подсистемы).

Будем вычислять силы валентных взаимодействий между атомами как находящимися в трёхмерном пространстве. Силы невалентных взаимодействий при этом будем рассчитывать, учитывая четырёхмерные координаты.

Для движения по четвертой координате будем использовать следующее уравнение: $s(t) = s_0 + vt$, где s_0 – начальное значение четвертой координаты (s_0 больше радиуса экранирования невалентных взаимодействий), v – скорость по четвертому измерению, $v < 0$. Движение прекращается, когда $s(t)=0$.

Таким образом, подсистема будет медленно входить в третье измерение, плавно расталкивая атомы ДНК.

Литература

1. Likhachev I.V., Balabaev N.K. Parallelism of different levels in the program of molecular dynamics simulation PUMA-CUDA. ICMBB. Pushchino, Moscow Region, Russia. 2018. P. e44. <https://doi.org/10.17537/icmbb18.53>.
2. Н.К. Балабаев. 4d-молекулярная динамика. Тез. докл. Всеросс. конф. «Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики», Пущино, 24–26 августа, 2022. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2022. С.25.