

Д.О. Торяник, канд. фіз.-мат. наук, доц. (ХДУХТ, Харків)

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ ТА ЙОГО ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

Метод молекулярної динаміки є одним з найбільш важливих інструментів теоретичного вивчення структури та динаміки біологічних макромолекул, рідин та інших молекулярних систем. Розроблений спочатку в теоретичній фізиці, метод молекулярної динаміки отримав велике поширення в науці про речовину, та починаючи з 1970-х років, в біохімії та біофізиці.

В теперішній час метод молекулярної динаміки широко використовується для дослідження структурних, динамічних та термодинамічних характеристик біологічних молекул та їх комплексів. Також важливу роль метод молекулярної динаміки грає при встановленні кінцевої структури молекул і комплексів, визначеною методами ЯМР і рентгеноструктурного аналізу, в фармації при розробці нових лікарських препаратів. Також є основи припускати, що цей метод є перспективним з приводу конструювання продуктів харчування із заданими властивостями.

В основі методу молекулярної динаміки лежить модельне представлення про багатоатомну молекулярну систему, в якій всі атоми представляють собою матеріальні точки. Причому поведінка окремого атому описується класичними рівняннями руху. Тому навіть проста система потребує розв'язання великої кількості диференціальних рівнянь. Це пов'язано з необхідністю мати програму, яка буде розраховувати траєкторію кожного атому системи впродовж заданого часу. На початку розвитку методу молекулярної динаміки кожний науковець писав свою програму, в якій було реалізовано метод молекулярної динаміки для конкретної молекулярної системи, що вивчалась. В теперішній час існує декілька пакетів програм для молекулярного моделювання методом молекулярної динаміки.

GROMACS (GROningen MACHine for Chemical Simulations) пакет молекулярної динаміки для моделювання фізико-хімічних процесів, розроблений групою Германа Берендсена з департаменту біофізичної хімії Гронінгенського університету. Пакет призначений для моделювання біомолекул та забезпечує високу швидкість розрахунків для незв'язаних взаємодій. GROMACS вважається одним з найшвидших інструментів. В програмі передбачено використання різних потенціалів взаємодії, запис траєкторії у файл, розрахунок

кількості водневих зв'язків та ін. В програмі реалізовано алгоритм паралельних розрахунків. GROMACS є вільним програмним забезпеченням з відкритим кодом, який розповсюджується під ліцензією GPL.

NAMD (NAnoscale Molecular Dynamics) – безкоштовна програма для молекулярної динаміки, яка написана з використанням моделі паралельного програмування Charm++, що забезпечує високу ефективність розпаралелювання і може використовуватись для симуляції великих систем (мільйони атомів). Програма була створена групою теоретичної та обчислювальної біофізики і лабораторією паралельного програмування Іллінойського університету. Програма підтримує мультіпроцесорність та можливість використовувати для розрахунків графічні процесори (технологія CUDA).

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) – вільний пакет для класичної молекулярної динаміки, який написаний групою з Сандійських національних лабораторій. Пакет може використовуватись для великих розрахунків (до десятків мільйонів атомів). Пакет розповсюджується під ліцензією GPL та доступний як у вигляді вихідних кодів так і скомпільованих пакетів для Microsoft Windows. Можна скомпілювати як паралельну версію LAMMPS так і версію для запуску в однопроцесорному режимі. В пакеті реалізована підтримка більшості двохчастинних і багаточастинних потенціалів. Крім молекулярної динаміки LAMMPS може використовуватись для проведення розрахунків мезоскопічних систем та колоїдних розчинів. Початкова конфігурація атомів для розрахунку може бути сгенерована в програмі або прочитана з текстового файлу. LAMMPS передбачає використання графічного процесора але тільки для потенціалів Леннард-Джонса та Кулона.

CPMD (Car–Parrinello Molecular Dynamics) – метод розрахунку ab initio квантово-механічної молекулярної динаміки, а також програмний пакет, який дозволяє проводити такі розрахунки. На відміну від класичної молекулярної динаміки молекулярна динаміка Кара-Паррінело дозволяє включати у розрахунки взаємодії електронів у розрахунках енергії, сили та руху. Але це призводить до значного збільшення часу розрахунків.

Ще існує декілька пакетів платних програм, таких як GROMOS, HyperChem, Gaussian та інші, які також дозволяють проводити розрахунки як в класичній молекулярній динаміці так і з використанням квантової механіки.