

Лекция 9: Стратегии молекулярной динамики

1 Стадии молекулярной динамики

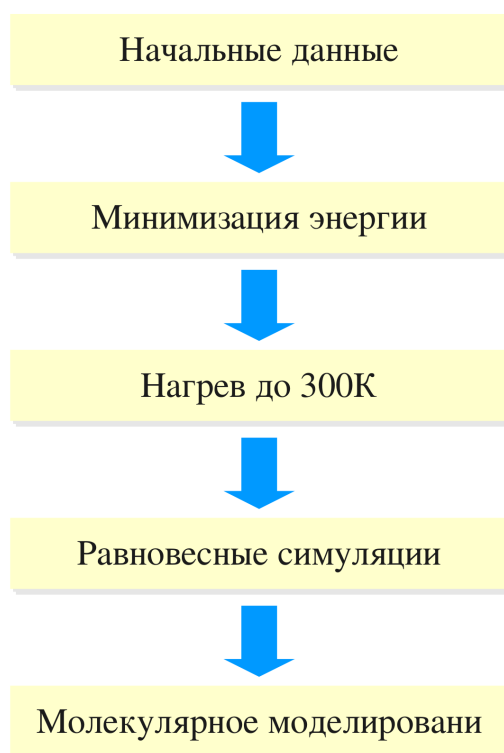


Рис. 1: Стратегия проведения симуляции молекулярной динамики

2 Начальные данные

Для проведения моделирования при помощи пакета молекулярной динамики потребуются следующие начальные данные:

1. Файл топологии (.psf). В данном файле содержится описание всех атомов в системе, включая их типы, заряды, массы, а также – информация о ковалентных взаимодействиях: пары атомов связанных ковалентно, тройки атомов, образующих углы, четвёрки атомов, образующих дигедральные углы.
2. Файл координат (.pdb). Данный файл содержит координаты атомов в декартовой системе координат.
3. Файл параметров силового поля (par_all22_prot.inp). В данном файле содержатся параметры для потенциалов силового поля – постоянные упругости ковалентных пружин, равновесные расстояния, углы и т.д.

3 Минимизация энергии

Так как начальная структура чаще всего берётся из базы данных белковых структур и была получена экспериментально, в первую очередь необходимо избавиться её от излишков энергии, связанных с пересечением сфер Ван-дер-Ваальса из-за ошибки позиционирования атомов в эксперименте. Конфигурационный файл для проведения минимизации энергии приведён на рисунке 2. В результате, энергия системы должна уменьшиться и выйти на асимптотическое значение, соответствующее локальному минимуму свободной энергии (Рис. 2).

4 Нагрев системы

В течение этого этапа, температура системы должны линейно возрасти с 0К до 300К (или другой желаемой температуры). В процессе нагрева системы, скорости атомов перераспре-

деляются согласно текущему значению температуры (Рис. 4).

5 Равновесные симуляции

Этот этап используется для того, чтобы уровнять потенциальную и кинетическую энергию системы, то есть распределить кинетическую энергию, полученную системой в процессе нагрева, по всем степеням свободы системы. При этом, кинетическая энергия поддерживается постоянной, а скорости атомов периодически переназначаются согласно температуре. Как только значение потенциальной энергии выходит на плато, этот этап можно завершить. На рисунке 5 показана зависимость температуры и энергии системы в процессе эквilibрации. Видно, что потенциальная энергия несколько увеличивается в самом начале симуляции.

```

# Топология системы и начальная структура (координаты)
structure      val_solv.psf
coordinates    val_solv.pdb

# Описание силового поля
paratypecharm on           # Выбор типа силового поля
parameters     par_all22_prot.inp # Файл с параметрами силового поля
exclude        scaled1-4     # Исключение/умножение локальных
                               # нековалентных взаимодействий
1-4scaling     1.0          # Фактор умножения для локальных
                               # нековалентных взаимодействий
dielectric     1.0          # Диэлектрическая проницаемость среды

# Нековалентные взаимодействия
switching      on           # Потенциал с переключением
switchdist    8.0          # Расстояние переключения (в А)
cutoff        12.0         # Радиус обрезки потенциала
pairlistdist  13.5         # Радиус обрезки списка соседей
stepspercycle 20           # Частота обновления списка соседей
rigidBonds    all          # Использовать алгоритм SHAKE
rigidTolerance 0.00001     # Толерантность SHAKE
rigidIterations 500       # Максимальное число итераций для SHAKE

# Суммирование Эвальда
PME            on           # Использовать PME для дальней электростатики
PMEtolerance  0.000001     # Толерантность алгоритма PME
PMEGridSizeX  32           # Количество точек в сетке PME
PMEGridSizeY  32           # в направлении осей x, y и z
PMEGridSizeZ  32
|
minimization   on           # Включить алгоритм минимизации энергии

# Параметры вывода результатов
outputenergies 1000        # Частота вывода энергий
outputtiming    1000        # Частота вывода данных о симуляции
binaryoutput    no         # Отключить сохранение бинарного вывода
outputname     output/val_min # Название файлов вывода
restartname     output/val_i # Название файлов перезапуска
restartfreq    10000       # Частота сохранения файлов перезапуска
binaryrestart   no         # Сохранять файлы перезапуска бинарно?
DCDfile        output/val_min.dcd # Название файла вывода координат
dcdfreq       1000        # Частота сохранения координат
numsteps       2000       # Число шагов

# Параметры для периодических граничных условий
cellBasisVector1 29.4 0.0 0.0 # Первый вектор периодичности
cellBasisVector2 0.0 29.4 0.0 # Второй вектор периодичности
cellBasisVector3 0.0 0.0 29.4 # Третий вектор периодичности
cellOrigin        0.0 0.0 0.0 # Начало координат для граничных условий
wrapWater         on        # Переносить координаты воды через граничные условия.

```

Рис. 2: Конфигурационный файл для минимизации энергии

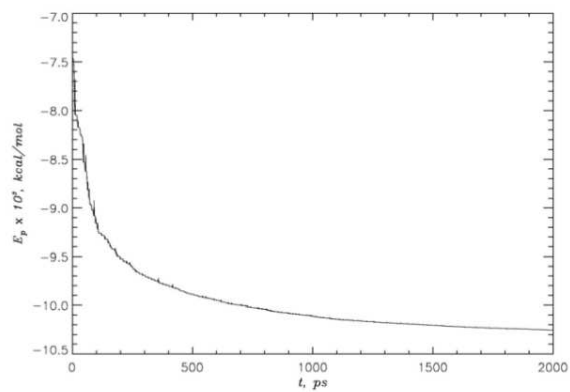


Рис. 3: График зависимости потенциальной энергии системы от времени в процессе минимизации.

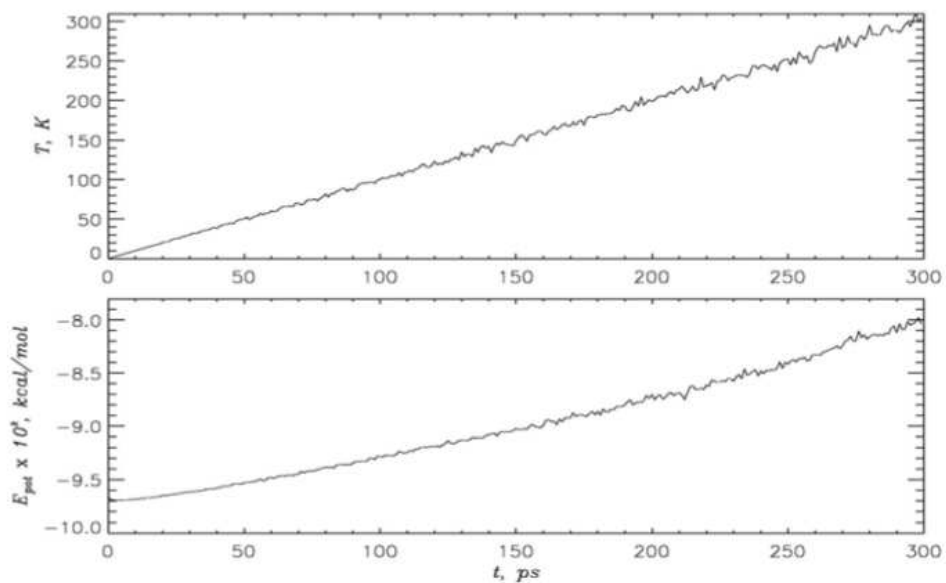


Рис. 4: График зависимости потенциальной энергии и расчётной температуры системы от времени в процессе нагрева.

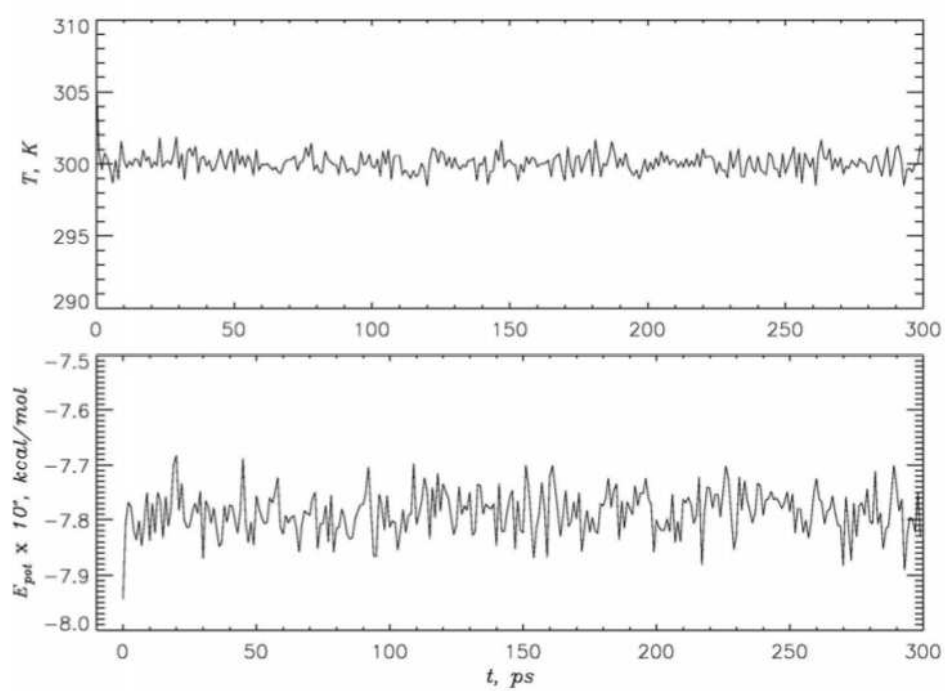


Рис. 5: График зависимости потенциальной энергии и расчётной температуры системы от времени в течение равновесных симуляций сразу после нагрева.