

CALCULATION OF LOCAL STRAIN TENSORS BASED ON THE RELATIVE MOTION OF NEIGHBORING PARTICLES OF A SOLVATED 5-DIMENSIONAL PEPTIDE

Andrey Sergeevich Kochkin^{1, 2a}, *Kirill Andreevich Tenikov*¹,
*Mikhail Dmitrievich Starostenkov*¹, *Anastasia Yurievna Varavina*³

¹ Altai State Technical University, Lenin Avenue 46, Barnaul, 656038, Russia

² Altai State University, Lenin Avenue 61, Barnaul, 656049, Russia

³ Altai College of Architecture and Civil Engineering, Lenin Avenue 68a, Barnaul, 656015, Russia

^a andre211@mail.ru

ABSTRACT

In this research paper, a peptide was considered, namely, the ratio of points of volumetric deformation from shear deformation was considered and the dependence of the output strain tensor on the output tension tensor was investigated. In this paper, the deformation in 2000 steps of the peptide was modeled with the calculation of the volumetric deformation from shear deformation and the calculation of local tensors was investigated. 1466 per simulated step was considered in more depth, since it was during the study at this simulated step that the particles and particles of the "neighbors" of the peptide showed the maximum peak of activity. The article considered two software packages. A freely distributed LAMMPS package for performing system modeling on multiprocessor computing systems, which implements the molecular dynamics method at its core, and in which the behavior of particles of a solvated 5-dimensional peptide was formed and implemented. And the freely distributed, second OVITO software package, which was used to visualize and recognize the deformation of the peptide. Namely, the OVITO package made it possible to recognize and calculate experimental data in the simulated atomic system, which are reflected in this scientific work.

KEYWORDS

Peptide; tensor; OVITO package; LAMMPS package; computer modeling.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ТЕНЗОРОВ ДЕФОРМАЦИИ НА ОСНОВЕ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ СОСЕДНИХ ЧАСТИЦ СОЛЬВАТИРОВАННОГО 5-МЕРНОГО ПЕПТИДА

Андрей Сергеевич Кочкин^{1, 2a}, *Кирилл Андреевич Теников*¹,
*Михаил Дмитриевич Старостенков*¹, *Анастасия Юрьевна Варавина*³

¹ Алтайский государственный технический университет, Россия, 656038, Барнаул, пр. Ленина, 46

² Алтайский государственный университет, Россия, 656049, Барнаул, пр. Ленина, 61

³ Алтайский архитектурно-строительный колледж, Россия, 656015, Барнаул, пр. Ленина, 68

^a andre211@mail.ru

АННОТАЦИЯ

В настоящей научно-исследовательской работе был рассмотрен пептид, а именно было рассмотрено соотношение точек объемной деформации от деформации сдвига и исследована зависимость выходного тензора деформации от выходного тензора растяжения. В данной работе была смоделирована деформация в 2000 шагов пептида с вычислением объемной деформации от деформации сдвига и исследовано вычисление локальных тензоров. Более углубленно рассматривался 1466 за моделированный шаг, так как именно при исследовании на этом за моделированном шаге проявили частицы и частицы «соседи» пептида максимальный пик активности. В статье рассматривались два программных пакета. Свободно распространяемый пакет LAMMPS для выполнения на мультипроцессорных вычислительных системах моделирование систем, реализующий в своей основе метод молекулярной динамики, и в котором было сформировано и реализовано поведение частиц сольватированного 5-мерного пептида. И свободно распространяемый, второй программный пакет OVITO, который применялся для визуализации и распознавания деформации пептида. А именно пакет OVITO позволил распознать и рассчитать в моделируемой атомной системе экспериментальные данные, которые отражены в данной научной работе.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Пептид; тензор; пакет OVITO; пакет LAMMPS; компьютерное моделирование.

Введение

Почти все конструкционные материалы имеют некоторые свойства упругости. Тело представляется совершенно упругим, когда через смещения, которые вызвали деформацию внешних сил, оно абсолютно реконструирует изначальную форму. Фундаментальной проблемой концепции упругости представляется определение напряжений и перемещений в разнообразных твердых телах. В настоящий момент времени научные исследования не представляются возможными без компьютерной (цифровой) симуляции. В особенности это связывается с тем, что, когда современные (цифровые) компьютерные методы применяются, удастся либо подтвердить, либо опровергнуть академические гипотезы, зачастую невозможные при осуществлении на практике. Более того, причиной моделирования физических процессов в основном заключается в финансовой составляющей в силу высокой стоимости естественных. Немаловажно то, что метод компьютерного (цифрового) исследования и моделирования достаточно неплохо

выработан и стоит на ряду с естественным экспериментом и теоретическими способами исследования. Современные (цифровые) компьютерные технологии помогают достичь реализации самых трудно затратных абстрактных моделях и приблизиться к объектам настоящего мира.

Компьютерные исследования, в одном ряду с теоретическими и естественными экспериментами, считаются общепризнанными методами изучения в физике, а в некоторых вариантах исключительно точными. К примеру, при изучении тех же пептидов, когда нужно вычислить локальные тензоры деформации на основе относительного движения соседних частиц.

Надежность и точность расчетов обусловливается применяемыми способами [4].

Пептиды – это цепочечные молекулы, содержащие от двух до ста остатков аминокислот, соединенных между собой амидными (пептидными) связями.

Тензор деформации – тензор, который характеризует сжатие (растяжение) и изменение формы в каждой точке тела при деформации.

Сольватация (от лат. solvo «растворяю») – электростатическое взаимодействие между частицами (ионами, молекулами) растворенного вещества и растворителя [1].

Впервые определение «пептиды» предложил знаменитый химик (1832–1919 гг.) Эмиль Фишер. «Пептиды – это цепочечные молекулы, содержащие от двух до ста остатков аминокислот, соединенных между собой амидными (пептидными) связями». Термин представляет собой соединение двух слов, а точнее первые и последние буквы веществ «пептоны» и «полисахариды», соответственно. Линейные пептиды весьма известны, и в момент, когда пептидная связь соединяет карбо- и аминоксильную функцию С- и N-концевых аминокислот, создаются циклические пептиды, со всевозможными размерами молекул [2, 7].

Число аминокислотных остатков пептида образуют с помощью греческой нумерации ди-, три-, тетра-, пента-, гекса-, гептапептиды и т.д. Однако, во избежание возможных проблем, Бодански выдвинул предложение, что пептиды следует изображать арабской цифрой по количеству аминокислот. Например, 8-пептид взамен октапептид, 9-пептид взамен нонапептид.

Полипептиды – это пептиды, созданные до ста аминокислотных остатков в молекулах, а олигопептиды – пептиды, содержащие менее десяти аминокислотных остатков.

Гомодетные и гетеродетные пептиды также известны; первые содержат исключительно пептидные связи, во-вторых наряду с пептидным связыванием могут пересекаться эфирные, дисульфидные или тиоэфирные связи [1, 3, 9].

Известно, что короткие пептиды владеют очень значительной активностью [4].

Обычно невозможно обеспечить синтез совершенно случайного пептида в условиях одновременного введения всевозможных аминокислот в одностадийный ректор из-за того, что стремительность связывания все-

возможных аминокислот кардинально выделяется в течении выполнения твердофазного пептидного синтеза [5, 6].

1. Метод моделирования

Вычисление локальных тензоров деформации сольватированного 5-мерного пептида требует детального понимания структуры и динамики пептида, а также окружающих молекул растворителя. Это сложная проблема, которая требует использования передовых вычислительных методов, таких как моделирование молекулярной динамики и инструменты анализа.

В случае сольватированного 5-мерного пептида моделирование включает моделирование пептида как набора атомов, соединенных химическими связями, а также окружающих молекул растворителя как набора частиц со своими собственными взаимодействиями.

Тензор характеризуется девятью скалярными величинами, которые записываются в виде матрицы:

$$T_{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Но если проигнорировать приращения напряжений и объемные силы, то получается уравнение равновесия для моментов относительно оси y :

$$\tau_{xz} dx dy dz - \tau_{zx} dx dy dz = 0. \quad (2)$$

Похожие уравнения возможно расписать и относительно осей x и z :

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}, \tau_{xz} = \tau_{zx}, \tau_{yz} = \tau_{zy}. \quad (3)$$

Тогда, тензор напряжений зеркален относительно основной диагонали, и для на-

хождения напряженного состояния в произвольной точке тела достаточно иметь шесть составляющих напряжений:

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}. \quad (4)$$

Так же, обычное напряжение определяется положительным, если оно инициирует растяжение, и отрицательным, если оно инициирует сжатие [8].

Мы смоделировали скрипт, в котором запрограммировали нужные нам параметры для исследования и последующего анализа пептида.

2. Результаты и обсуждение

Следующим шагом мы взяли в OVITO 1466 шаг моделирования из 2000 (рис. 1) и в рамках данного исследования перенесли координаты локальных тензоров деформации на основе относительного движения соседних частиц сольватированного 5-мерного пептида на диаграмму 1466 шага.

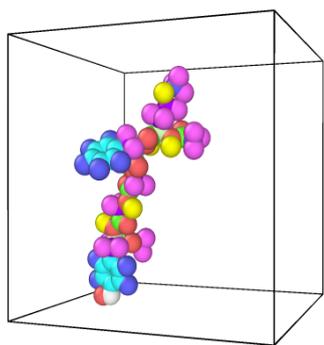


Рис. 1. 1466 шаг моделирования из 2000

Fig. 1. 1466th simulation step out of 2000

Далее, мы выполнили адаптированные расчеты деформации, базирующийся на двух входных конфигурациях частиц: текущей или деформированной конфигурации и эталонной конфигурации. Локальная деформация, рассчитывалась касательно определенного прямо заданного изначального расположения входных частиц. В текущей конфигурацией были просчитаны загруженные позиции частиц.

Параметры адаптации использовали последующим шагом, который распоряжается диапазоном соседей, учитываемых при подсчете тензора градиента деформации атома для частицы. Данными условиями мы адаптировали и определили размер сферического объема вокруг частицы, по которому усредняется относительное движение соседних частиц для получения меры деформации континуума. Стоит отметить, что мы взяли внушительный радиус отсечки, по нашему мнению, а именно в 6,3 десятых – что будет давать медленно, но плавно меняющиеся значения деформации в атомных узлах. 6,3 десятых – это радиус отсечки, которому, чтобы вычислить тензор градиента деформации, требуется в пределах диапазона отсечки центральной частицы как минимум три «соседа».

В случае, когда в границах доступности центральной частицы располагается менее трех «соседей», которые также не должны быть в одной плоскости – будет ошибка в расчетах, так как «соседей» будет недостаточно для подсчета тензора при малых отсечках.

Следующим шагом мы убедились, что в недеформированной конфигурации располагается достаточное количество соседей в установленном диапазоне отсечки, так как градиент деформации вычисляется по относительному движению соседних частиц в каждом месте [1]. Следовательно, из выше описанного исследования получилась диаграмма (рис. 2) соотношения точек объемной деформации от деформации сдвига.

Исходя из диаграммы видно, что относительная связь является линейной. Так как под действием нагрузки тело деформируется и его объем изменяется, и деформация сдвига в данном случае повторяет объемную деформацию. На участке, а именно в точках 15, 20, 50, 67 и т.д., мы считали, что пределы пропорциональности и упругости считаются совпадающими, так как кривые очень малы.

Следующим шагом мы исследовали зависимость тензора деформации от тензора растяжения (рис. 3).

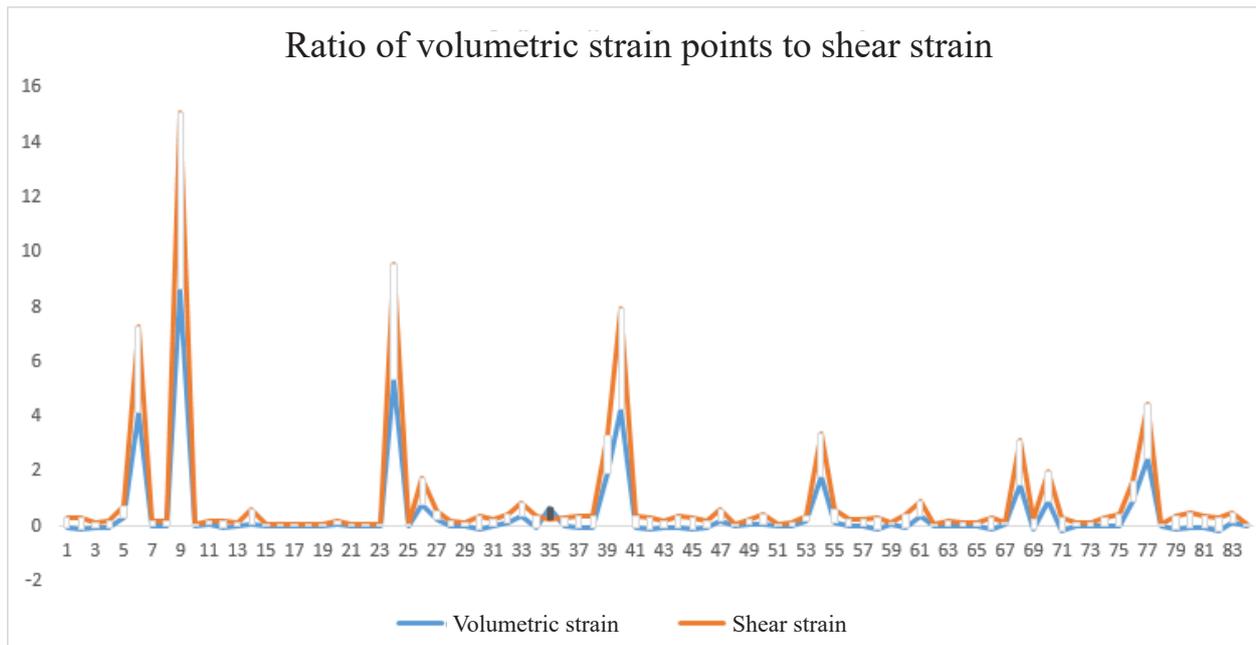


Рис. 2. Соотношение точек объемной деформации от деформации сдвига

Fig. 2. The ratio of volumetric strain points to shear strain

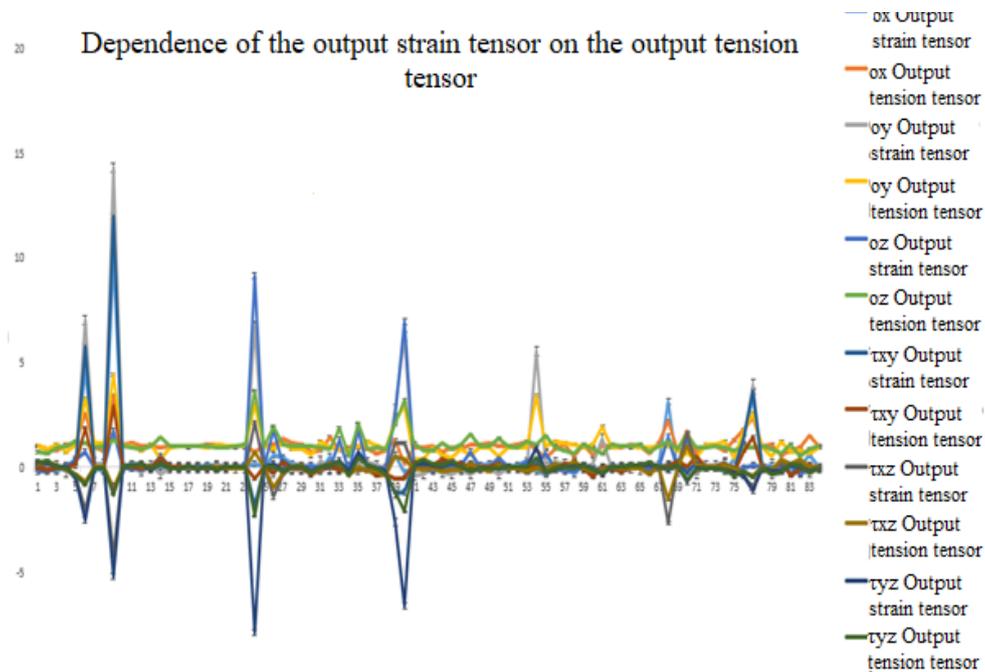


Рис. 3. Зависимость выходного тензора деформации от выходного тензора растяжения

Fig. 3. Dependence of the output strain tensor on the output tension tensor

Деформация тензора по x протекает в самом начале и в конце более интенсивно в зависимости от растяжения x , растяжение по x же в свою очередь происходит немного спокойнее. В обоих случаях прослеживается практически идентичная последовательность поведения тензора деформации и тензора растяжения, но лишь с разницей в пару положительных импульсов в начале и в конце.

Деформация тензора по y сымпульсировалась на самый большой экстремум на графике, это связано с тем, что сдвиг изменил исследуемую форму в более жесткое положение. Тензор растяжения по y практически полностью повторил тензор деформации по y , но с учетом, что напряжение было меньше на 43,65%.

Деформация тензора по z в начале развивалась линейно – стабильно, но на медиане происходит всплеск, в отличие от тензора растяжения, который так же повторяет деформацию по z , за исключением некоторых участков.

По тензору xu видно, что на двух участках деформация уходит в отрицательные значения, в отличие от растяжения xu .

На следующем шаге деформации тензора xz и растяжение тензора xz полностью совпадают друг с другом за исключением 8 координат из 82. И наконец, тензор растяжения по yz так же совпадает с тензором деформации за исключением 6 координат из 82.

В целом, выходной тензор деформации более интенсивен, чем выходной тензор растяжения. Также проглядывается симметричность на большей части графика, что свидетельствует о прямой зависимости между тензорами.

Заключение

Вычисление локальных тензоров деформации сольватированного 5-мерного пептида требует детального понимания структуры и динамики системы, а также передовых вычислительных методов.

Анализ результирующей траектории может дать представление о локальной деформации пептида. Тензор локальной деформации, который описывает деформацию материала в ответ на приложенные напряжения или силы, может быть рассчитан для каждого атома или группы атомов внутри пептида путем сравнения относительного движения соседних частиц.

Для вычисления тензора локальной деформации одним из подходов является использование тензора градиента деформации, который описывает деформацию материала в ответ на приложенные силы или напряжения. Тензор градиента деформации может быть вычислен путем сравнения положений соседних атомов или групп атомов в разные моменты времени во время моделирования молекулярной динамики.

Как только тензор градиента деформации вычислен, его можно использовать для определения локального тензора деформации для каждого атома или группы атомов внутри пептида.

В целом, вычисление локальных тензоров деформации сольватированного 5-мерного пептида является сложной задачей, требующей использования передовых вычислительных методов и инструментов анализа. Полученная информация может дать ценное представление о структуре и динамике пептида и его взаимодействиях с окружающими молекулами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Information about Ovito. simulation visualization. URL: <https://www.ovito.org/>
2. Kruchinin A. G., Bolshakova E. I. Hybrid Strategy of Bioinformatics Modeling (in silico): Biologically Active Peptides of Milk Protein // Food Processing: Techniques and Technology. 2022. V. 52, No. 1. P. 46–57. DOI: 10.21603/2074-9414-2022-1-46-57.
3. Брагин А. О. Компьютерный анализ связи конформационных пептидов с аллергенностью белков: автореф. дис. ... канд. биол. наук: 03.01.09. Новосибирск, 2013. 17 с.
4. Иванова Н. Ю., Медведева Ю. В., Кочкин А. С. Использование идеальной шестигранной решетки

в молекулярной динамике на примере релаксации Монте Карло // Автоматизированные системы как фундамент технологического прорыва: сборник статей Международной научно-практической конференции (Тюмень, 8 апреля 2020 года). Тюмень: ООО "Агентство международных исследований", 2020. С. 26–29.

5. Кит С. Л. Неупорядоченная библиотека пептидов, способ ее получения и способ идентификации пептида, синтезированного твердофазным синтезом // Патент РФ 2145233, МПК А61К 38/02, А61К 38/00, А61К 39/00. Оpubл. 10.02.2000.

6. Мясоедов Н. Ф., Андреева Л. А., Голиков Д. В. Способ получения рекомбинантного пептида и по-

лученный пептид // Патент РФ 2507212, МПК С07К 5/00, С07К 7/00. Оpubл. 20.02.2014.

7. Володькин А. А., Арцис М. И., Миль Е. М., Бинюков В. И., Абзальдинов Х. Х. С., Стоянов О. В., Колпакова М. В. Прогнозирование свойств модифицированных пептидов методом квантовой химии // Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23, № 3. С. 23–26.

8. Старов А. В., Воронкова Г. В. Теория упругости. Курс лекций с примерами решения задач. Волгоград: ВолгГАСУ, 2015. 58 с.

9. Якубке Х. Д., Ешкайт Х. Аминокислоты, пептиды, белки. М.: Мир, 1985. С. 92–94.