

А. Л. Рабинович, Д. В. Журкин (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН, ПетрГУ). **К вопросу о реализации выборки по значимости при генерировании непрерывного спектра конформаций цепных молекул методом Монте-Карло.**

Описан алгоритм, позволяющий существенно ускорить сходимость расчетов средних значений макроскопических величин макромолекул, проводимых методом Монте-Карло (МК). Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_{N-1}$ — углы внутреннего вращения вокруг связей основной цепи макромолекулы (N — количество атомов основной цепи) и пусть U — ее энергия, которую можно представить в виде $U = \sum_{i=1}^{N-3} U_{m_i}(\varphi_i, \varphi_{i+1}, \varphi_{i+2})$, где U_{m_i} — энергии фрагментов цепи, m_i — индекс фрагмента (m — идентификационный номер, i — номер в цепи). В процедуре генерирования конформаций методом МК в пространстве торсионных углов макромолекулы организована выборка пропорционально функции распределения $\prod_{i=1}^{N-3} \exp[-U_{m_i}(\varphi_i, \varphi_{i+1}, \varphi_{i+2})/k_B T]$. Табулировали значения каждой $U_m(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ по трем углам вращения. При данной температуре T рассчитывали функции $\exp[-U_m(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)/k_B T]$ для каждого m и численным методом вычисляли интегралы $\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-U_m(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)/k_B T] d\varphi_1 d\varphi_2 d\varphi_3$. Пусть величина каждого такого интеграла равна I_m . Для каждого m область от 0 до 2π по углам $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ разбивали на 1000000 параллелепипедов (состояний) так, чтобы вероятности осуществления каждого из состояний были одинаковыми. Сначала рассчитывали такие значения по углу φ_1 , которые делили трехмерное пространство на 100 слоев, в которых интегралы от функции $\exp[-U_m(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)/k_B T]$ были равны $I_m/100$. Каждый из слоев затем делили по углу φ_2 на 100 равновероятных подслоев из условия, чтобы интегралы от этой функции по каждому подслою были равны $I_m/10000$. Наконец, каждый подслой делили по углу φ_3 на 100 параллелепипедов так, чтобы интегралы от этой функции по каждому параллелепипеду были равны $I_m/1000000$. Массив чисел-граней между 1000000 параллелепипедами по всем трем углам данного фрагмента является аппроксимацией непрерывных распределений плотностей вероятностей $\exp[-U_m(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)/k_B T]$. При генерировании конформаций цепи с углами $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \dots$ составляли надлежащую последовательность фрагментов, воспроизводящих строение данной цепи. Номерам каждой тройки углов во фрагментах присваивали последовательные номера $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$, $(\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4)$, $(\varphi_3, \varphi_4, \varphi_5)$ и т. д. вдоль по цепи. Для выбора значений первой тройки углов $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ в данной цепи методом МК случайно выбирали один из 1000000 параллелепипедов. После этого в пределах избранного параллелепипеда, пренебрегая изменениями плотности вероятности, случайно выбирали точные значения $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$. Очередной угол φ_4 выбирали из фрагмента с тройкой углов $\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$, но лишь в тех параллелепипедах этого фрагмента, в которые попали уже избранные значения углов φ_2 и φ_3 . После случайного выбора одного из таких параллелепипедов случайно выбирали внутри него значение φ_4 . Выбор значений всех последующих углов φ_i , ($i = 5, 6, \dots, N-1$) осуществляли аналогично выбору угла φ_4 . В общем случае номера углов могут следовать не

поряд, здесь подразумевается последовательность только варьируемых углов. Размеры параллелепипедов (по углам $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$), выбранных при генерировании очередной конформации цепной молекулы, позволяют оценить вероятность ее генерирования и использовать в формуле для оценки средних в методе Монте-Карло.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а) и программы Президента РФ — Ведущие научные школы (НШ-1642.2012.4).