

## Лекция 6

### Методы компьютерного моделирования в физике (продолжение)

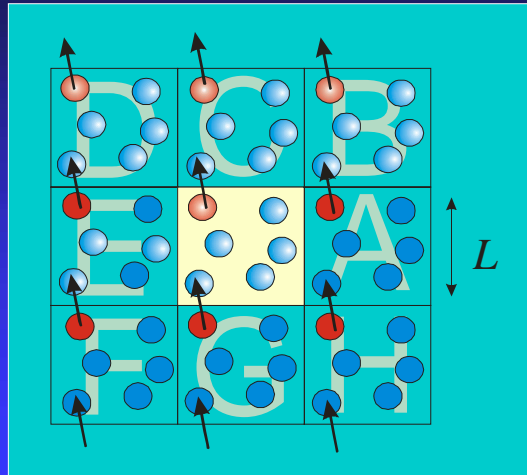


## План лекции

- Моделирование бесконечных объема или поверхности: Периодические граничные условия
- МД-моделирование динамики молекул
  - ◆ Моделирование потенциала молекул
  - ◆ Пример: Механизм зрения
- Фракталы: Основные понятия
- Самоорганизация в природе и искусственная жизнь. Примеры



## Периодические граничные условия



2D квадратная периодическая решетка

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

3



## Модельная (эмпирическая) потенциальная поверхность

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = U_s + U_b + U_{\text{tor}} + U_{\text{vw}} + U_{C_2C_2'}$$

$$U_s = 0.5 \sum_b k_b (b - b_0)^2$$

$$U_b = 0.5 \sum_\varphi k_\varphi (\varphi - \varphi_0)^2$$

$$U_{\text{tor}} = 0.5 \sum_\theta \{ V_2 [1 - \cos(2\theta)] + V_4 [1 - \cos(4\theta)] \} = \sum_\theta [V_2 \sin^2(\theta) + V_4 \sin^2(2\theta)]$$

$$U_{\text{vw}} = \sum_r \begin{cases} f [-2.25/r_n^6 + 8.28 \times 10^5 \exp(-r_n/0.0736)], & \text{if } r \geq r_0; \\ V \exp(-kr_n), & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$U_{C_2C_2'} = D_{CC} \{ \exp[-2\beta_c(R_{CC} - R_{eq})] - 2 \exp[-\beta_c(R_{CC} - R_{eq})] \}$$

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

4



## Пример: Механизм зрения

**Vision**

The rhodopsin molecule is the first link in the chain that leads from light's hitting the eye to the brain's acknowledging that light.

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

5



## Пример: Механизм зрения

**Rhodopsin**

Consists of two parts:

- 1 The photosensitive pigment, **retinal**
- 2 The remainder of the molecule **opsin**

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

6



## Пример: Механизм зрения

**Light Absorption**



When light is absorbed by 11-cis retinal, enough energy is given to the molecule that it can go to the **all-trans** configuration.

17 November 2001

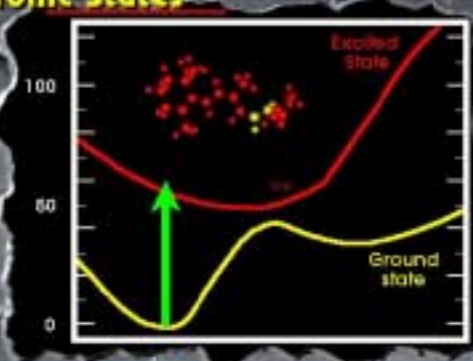
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

7



## Пример: Механизм зрения

**Electronic States**



When **retinal** absorbs a visible photon, it makes a jump from one state to another.

17 November 2001

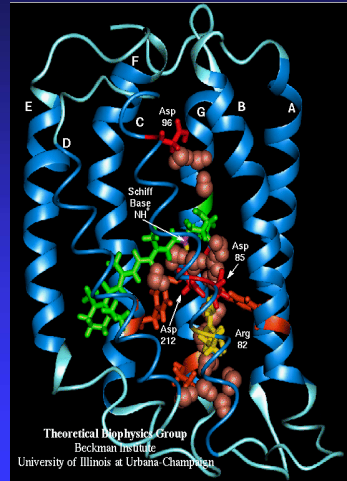
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

8



## МД моделирование молекулы бактериородопсина (bR)

- bR – это мембранный протеин (мембрана Halobacterium Halobium)
- Функция bR в Природе – передача протона
- Этот механизм управляется светом (молекула ретиналя внутри каждой молекулы bR является приемником)
- bR содержит около 4000 атомов



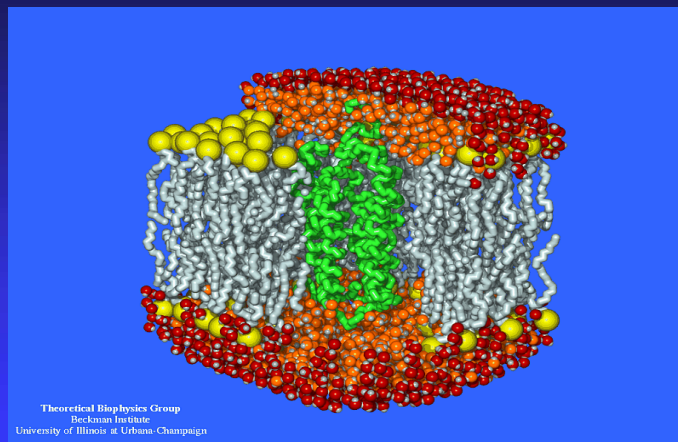
17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

9



## МД моделирование молекулы бактериородопсина (bR)



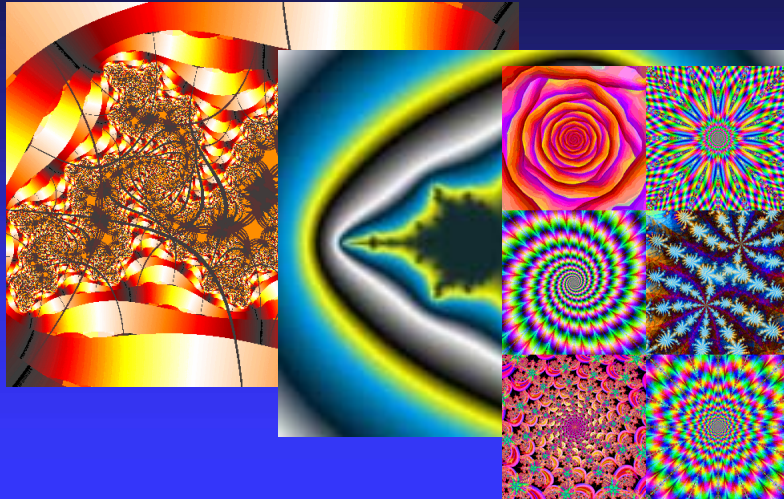
17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

10



## Многообразие фракталов



17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

11



## Фракталы: ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

- Понятие фрактала введено впервые Бенуа Мандельбротом (1977)
- Фракталом называется множество, для которого его хаусдорфова размерность строго больше топологической ( $d_H > d_T$ )



17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

12



## Фракталы: Основные понятия

- Топологическая размерность
- Хаусдорфова размерность
- Самоподобные кривые. Примеры
- Определение фрактала  
(по Мандельброту)

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

13



## Примеры фрактальных множеств



Кривая Коха



Треугольный  
невод



Ковер  
Серпинского

17 November 2001

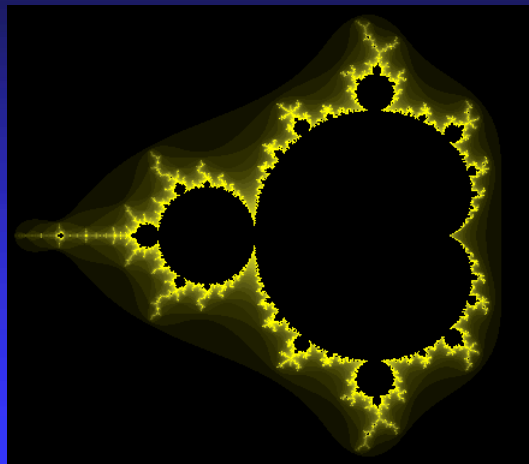
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

14





## Множество Мандельброта



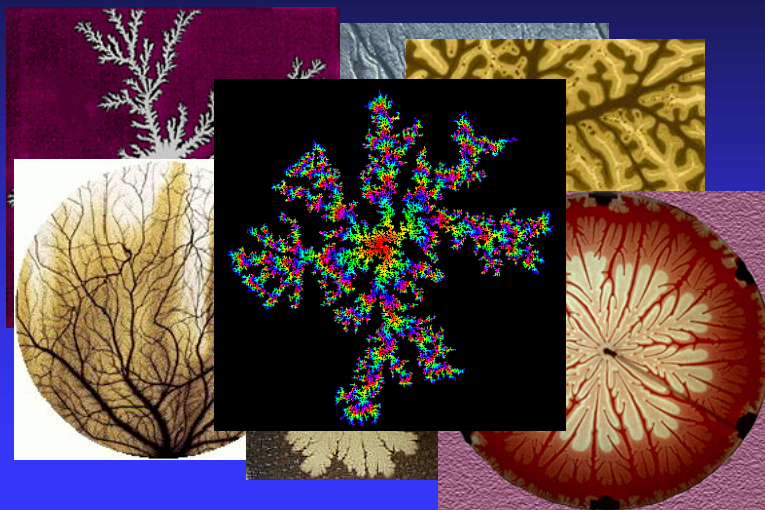
17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

15



## Самоорганизация в природе и искусственная жизнь



17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

16





## Реальная и искусственная жизни

- Динамика систем в природе зачастую определяют **простые** локальные взаимодействия
- Динамику поведения сложных систем в природе зачастую невозможно или очень сложно промоделировать на компьютере, поскольку неизвестны законы динамики
- Сходство динамики различных сложных систем с одинаковой природой локальных взаимодействий в них

17 November 2001

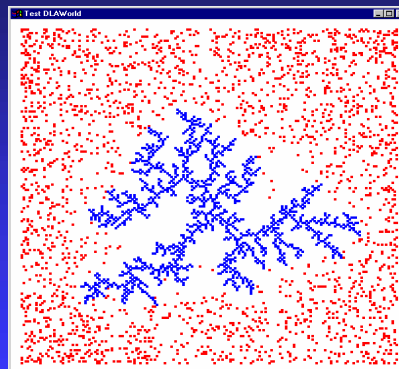
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

17



## Ограниченная диффузией агрегация

- Рост кристаллов
- Рост коралловых рифов



17 November 2001

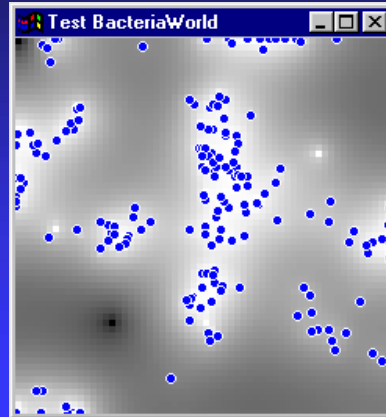
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

18



## Жизнь бактерий E.Coli: Градиентная динамика

- Если концентрация не уменьшается, сдвинуться вперед
- В противном случае, случайный поворот



17 November 2001

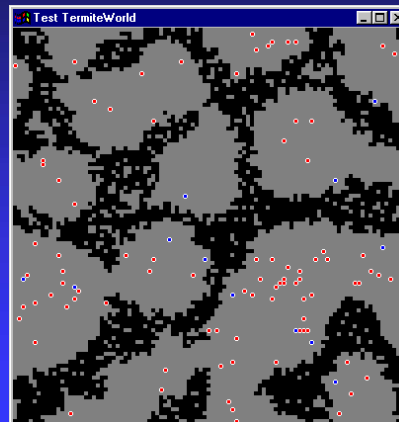
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

19



## Термиты: Выедание термитных структур в древесине

- Случайное блуждание
- Если встретил дерево и не несет кусок древесины, взять кусок дерева
- Если встретил дерево и несет кусок древесины, не брать новый кусок дерева



17 November 2001

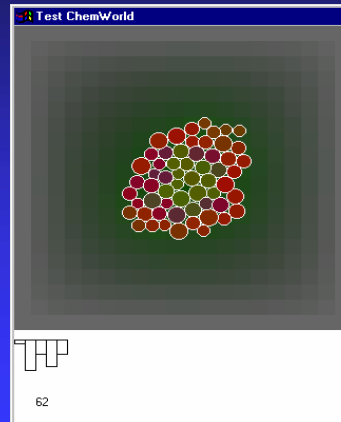
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

20



## Cell Differentiation

- 20 Chemicals.
- Diffuse Medium.
- Reactions inside cells.
- Newtonian dynamics.
- Results:
  - ◆ Chaotic Internal Dynamics.
  - ◆ Cell Differentiation: Differing Attractors.



17 November 2001

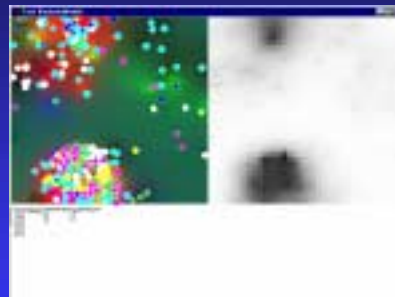
Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

21



## Example 5: Competing 'Bacteria'

- 3 Chemicals Plus 'Air'
- Gradient Following, as with E.Coli example.
- Asexual Reproduction with mutation.
- Each chemical either eaten, produced, or poisonous to each bacteria.



17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

22



## Ограничения моделей “искусственной жизни”

- Модели реальной жизни являются упрощенными
- Необходимы значительные вычислительные ресурсы
- Не все локальные взаимодействия в реальной жизни являются простыми
- Модели искусственной жизни должны быть обобщены на многие пространственные и временную степени свободы с учетом соответствующих характерных масштабов системы
- Искусственная жизнь, как и реальная, является массивно-параллельным процессом со множеством локальных связей и, таким образом, ее моделирование оптимально на параллельных компьютерах

17 November 2001

Victor N. Zadkov: Lectures on Computer Physics

23