Моделирование пространственной формы молекул РНК с помощью метода конечных элементов.

Сабитов Денис Иджадович

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E–mail: sabitovdi@yandex.ru

Введение

В работе [2] была предложена модель, описывающая пространственную форму РНК как систему тонких упругих стержней. Пространственная структура молекулы собирается из стеблей и петель в соответствии с заданной вторичной структурой. Форма петли определяется решением краевой задачи для уравнений равновесия стержня. Для решения краевой задачи предлагается использовать метод конечных элементов (МКЭ).

Вариационная постановка задачи

Тонкий упругий стержень – это полоса, осевая линия которой совпадает с осевой линией стержня. Положение вектора полосы для стержня в напряженном состоянии определяется аксиомами теории упругости. С полосой связываются две системы координат: трёхгранник Френе и главная сопутствующая система, составленная из касательного вектора, вектора полосы и дополненная до правой тройки. В естественных осях положение вектора полосы задаётся углом между вектором полосы и вектором нормали осевой линии $\theta(s)$, где s – натуральный параметр полосы. Кривизна $k(s)$ и кручение $\chi(s)$ осевой линии стержня выражаются через её радиус-вектор $\vec{r}(s) = \{x(s), y(s), z(s)\}$ [3].

Вектор Дарбу в главной сопутствующей системе координат записывается как $\vec{\omega} = \left\{\chi(s) + \theta'(s), k(s)\sin\theta(s), k(s)\cos\theta(s)\right\}^T$. Упругая энергия полосы длины L вычисляется с помощью вектора Дарбу: $W = \dfrac{1}{2}\int_0^L (\vec{\omega} - \vec{\omega}_0)^T B(\vec{\omega} - \vec{\omega}_0)ds$, где $\vec{\omega}_0$ - вектор Дарбу начальной формы стержня, $B = B(s)$ – тензор упругости тонкого стержня.

По определению натурального параметра, функции $x(s), y(s), z(s)$ должны удовлетворять условию $x'^2 + y'^2 + z'^2 \equiv 1$. При выборе в качестве параметров функций $\varphi(s)$ и $\phi(s)$ таких, что $x'(s) = \sin(\varphi)\cos(\phi)$, $y'(s) = \cos(\varphi)\cos(\phi)$, $z'(s) = \sin(\phi)$, условие натуральности выполняется для любого s.

Неизвестные функции $\varphi(s)$, $\phi(s)$ и $\theta(s)$, заданные на отрезке $[0; L]$, проектируются на систему линейных базисных функций одномерного метода МКЭ и подставляются в функционал для упругой энергии, который минимизируется методом градиентного спуска. Краевые условия на неизвестные функции учитываются с помощью метода неопределённых множителей Лагранжа. [1]

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. (2003) Численные методы. – 3-е изд., перераб. и доп. М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 632 с
2. Козлов Н.Н, Кугушев Е.И., Сабитов Д.И., Энеев Т.М. (2002) Компьютерный анализ процессов структурообразования нуклеиновых кислот // Препринт ИПМ им М.В. Келдыша РАН, № 42.
3. Рашевский П.К. (1956) Курс дифференциальной геометрии. – 4-е изд. М., Государственное издательство технико-теоретической литературы.