

# Análise de Padrões Gradientes de Cadeias Moleculares Simuladas

Márcia Rodrigues Campos<sup>1</sup>  
marcia@lac.inpe.br

Nandamurdi Vijaykumar<sup>1</sup>  
vijay@lac.inpe.br

Susumu Fujiwara<sup>2</sup>  
fujiwara@ipc.kit.ac.jp

Reinaldo R. Rosa<sup>1</sup>  
reinaldo@lac.inpe.br

Fernando M. Ramos<sup>1</sup>  
fernando@lac.inpe.br

Hong Qian<sup>3</sup>  
qian@amath.washington.edu

<sup>1</sup> Núcleo para Simulação e Análise de Sistemas Complexos  
Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC)  
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)  
São José dos Campos, SP

<sup>2</sup> Theory and Computer Simulation Center  
National Institute for Fusion Science  
Gifu, Japan

<sup>3</sup> Department of Applied Mathematics  
University of Washington  
Seattle, USA

## Resumo

A Análise de Padrões Gradiente (GPA) [2,3,4] foi aplicada pela primeira vez em cadeias moleculares simuladas (usando o modelo de Fujiwara-Sato [1]) com o objetivo de caracterizar pequenas quebras de simetria e desordem de fase impostas por flutuações térmicas. O efeito das flutuações térmicas é simulado através do aquecimento da temperatura do banho em que as moléculas estão imersas (que pode variar de 0 a 400 K). O propósito desse trabalho é mostrar que o parâmetro de Rigidez Assimétrica ( $R_A$ ) obtido através da temperatura do banho, da distância da cadeia central (raio de aspecto,  $\Gamma$ ) e do valor adimensional de  $F_A$  dado pelo uso da GPA, é sensível as variações do modelo. Para finalizar, discutimos essas simulações, as análises e os resultados levando em consideração efeitos do campo gravitacional.

## 1. Introdução

A formação estrutural de uma cadeia de moléculas é investigada por meio de simulações de dinâmica molecular no modelo de Fujiwara-Sato [1]. Nesse modelo é observado que a partir de altas temperaturas e passando

por um resfriamento, as cadeias que apresentavam uma configuração inicial randômica tendem a uma configuração final ordenada. Além disso, as cadeias mais próximas do centro atingem essa ordenação mais rapidamente. Esse modelo será descrito na seção 2.

Com a aplicação da GPA nos dados do modelo, deduzimos um parâmetro que é sensível aos padrões observados. O método de GPA, sua aplicação no modelo e o parâmetro deduzido são descritos na seção 3. Os resultados e a discussão sobre novos estudos são apresentados, respectivamente, nas seções 4 e 5.

## 2. O Modelo de Fujiwara-Sato

O modelo de Fujiwara-Sato [1] consiste de 100 cadeias, cada uma com 20 elementos  $\text{CH}_2$ . Essas 100 cadeias são dispostas como uma cadeia central e um conjunto de cadeias secundárias interagindo através de potenciais ligados e potenciais não-ligados. Os potenciais ligados são os potenciais de estiramento, dobramento e de torção. Os potenciais não-ligados são devidos à força molecular de *Van der Waals* cujo potencial principal é o de *Lennard-Jones*.

Com a interação desse sistema teremos o tempo de oscilação que é devido principalmente ao potencial de

*Lennard-Jones*. Esse tempo de oscilação, ou seja, da flutuação local do sistema, é dado pela seguinte expressão:

$$\tau_{ij} = 2\pi [(I/k_{ij})^{1/2} + \Delta_{ij}] \quad (1)$$

com

$$\Delta_{ij} = R \cdot k_{ij} \quad (2)$$

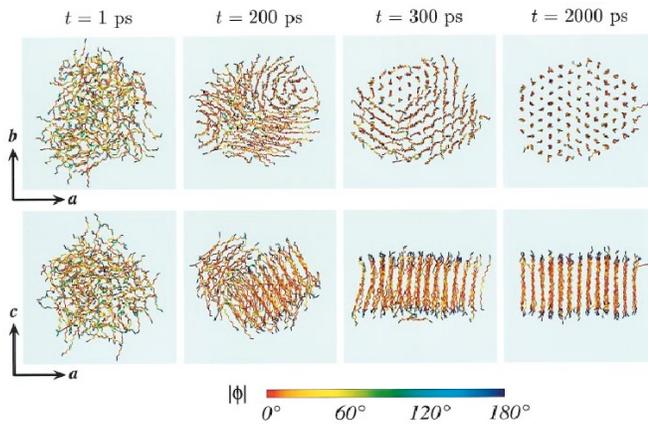
onde

$I$  é o momento de inércia do sistema

$k_{ij}$  são os termos do potencial de *Lennard-Jones*

$\Delta_{ij}$  é um termo relacionado à rigidez da cadeia que também depende da força de *Van der Waals*

A Figura 1 mostra um exemplo da evolução do sistema na qual a escala de tempo é dada em pico-segundos. É possível observar que no início temos uma mistura randômica dessas cadeias que tende a padrões bem ordenados no final.



**Figura 1. Configurações de 100 pequenas cadeias para  $T=400$  K em vários tempos  $t=1, 200, 300$  e  $2000$  ps**

Conforme Fujiwara-Sato [1], a rigidez global da cadeia é inversamente proporcional à temperatura do banho e inversamente proporcional ao raio de aspecto, ou seja, as escalas mais próximas da cadeia central são mais rígidas e as escalas mais distantes da cadeia central são menos rígidas.

$$R \approx T^{-1} \cdot \Gamma^{-1} \quad (3)$$

### 3. Metodologia (GPA $\rightarrow$ MFS)

Descreveremos a seguir os procedimentos realizados para aplicar a Análise Padrão de Gradientes (GPA) no modelo de Fujiwara-Sato (MFS).

#### 3.1. Análise de Padrões Gradientes

O operador AAF (*Asymmetric Amplitude Fragmentation*) é a técnica utilizada para caracterizar a relaxação do sistema.

O operador AAF calcula o grau de quebras de simetria presentes no campo gradiente de uma matriz, dois vetores

de  $\nabla E$  são chamados vetorialmente simétricos se possuem o mesmo módulo e orientações opostas.

O grau de fragmentação assimétrica de  $\nabla E$  é medido pelo parâmetro  $F_A$  por meio dos seguintes passos:

1. É construído o gradiente da matriz  $M$ , com  $V$  vetores, caracterizando a variação espacial de intensidade pixel a pixel;
2. Todos os pares de vetores simétricos são removidos, permanecendo apenas o campo gradiente assimétrico. Esse campo gradiente assimétrico de  $M$  será transformado num campo escalar, onde cada ponto nesse escalar corresponde ao ponto médio de cada vetor;
3. O terceiro passo é construir o campo de Triangulação de *Delaunay* do campo escalar. Esse campo vai conter uma quantidade  $L$  de pontos e uma quantidade  $I$  de linhas de conexão, fornecendo o total de lados dos triângulos.

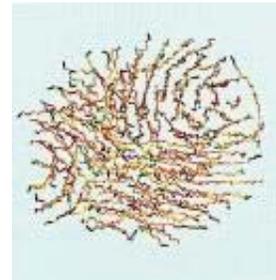
O parâmetro de fragmentação assimétrica é dado pela seguinte equação:

$$F_A = \frac{(I - L)}{L} \quad (4)$$

respeitando a restrição  $I > L$ .

#### 3.2. Mapeamento de seção reta da cadeia em grade densa de flutuações

Para estudarmos os padrões dessa evolução dinâmica, que é apresentada em 3 dimensões, com GPA que trabalha em 2 dimensões, é necessário fazer o mapeamento da seção reta da cadeia no que chamamos de grade densa de flutuações. Para isso é escolhida uma seção reta central do sistema que contém informação sobre essas flutuações. A partir dessa seção reta é montada uma matriz densa que irá mapear o contínuo desse campo em uma superfície onde podemos analisar quais são as amplitudes ligadas a cada ponto. As etapas desse mapeamento podem ser exemplificadas pelas Figuras 2, 3 e 4.



**Figura 2. Cadeias de  $CH_2$  interagindo**

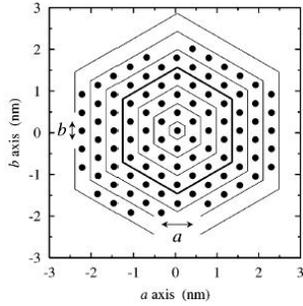


Figura 3. Seção reta do modelo

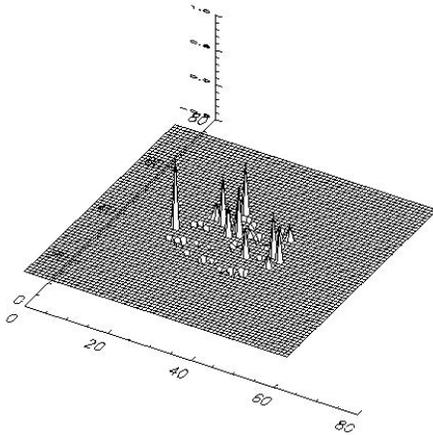


Figura 4. Campo das flutuações da rigidez da cadeia

### 3.3. Rigidez Assimétrica

Para analisarmos esse sistema de uma forma local, estamos definindo o que chamamos de rigidez assimétrica, que é dada pela seguinte expressão.

$$R_A = T^{-1} \cdot \Gamma^{-1} \cdot F_A \quad (5)$$

O parâmetro de fragmentação assimétrica ( $F_A$ ) é calculado a partir do campo gradiente dessas matrizes e apresenta uma sensibilidade às flutuações desse modelo. Constatamos que dada uma temperatura constante e um raio de aspecto constante, o  $F_A$  e, conseqüentemente, a Rigidez Assimétrica ( $R_A$ ) possui uma sensibilidade bastante alta nas flutuações de fase, módulo e quebra de simetria, como pode ser notado nos resultados apresentados na Figura 5.

### 4. Resultados Preliminares

Nesses resultados estamos mostrando a aplicação dos valores da rigidez assimétrica para diferentes raios de aspecto. Podemos observar que os valores de  $R_A$  registram os decaimentos da rigidez com a distância da cadeia central e sua variabilidade local.

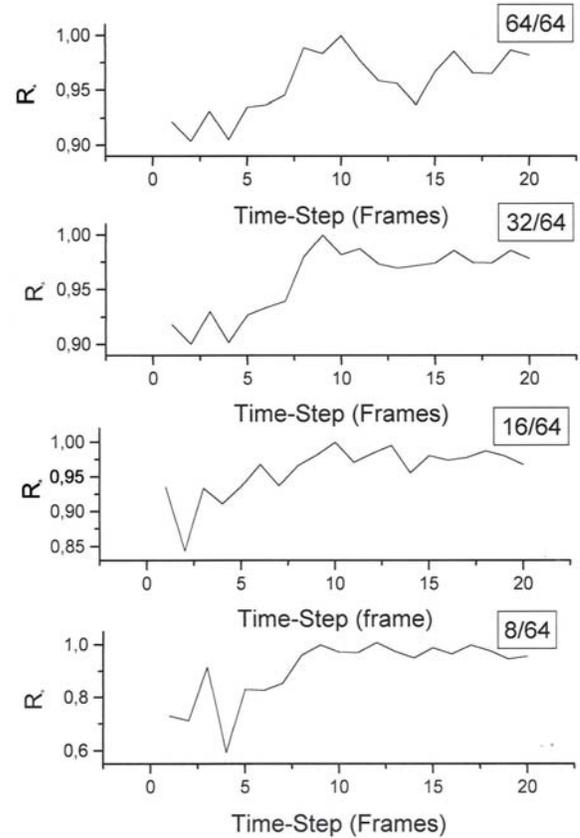


Figura 5. Resultados de  $R_A$  no tempo para diferentes raios de aspecto

### 5. Conclusões

A Rigidez Assimétrica ( $R_A$ ) é um parâmetro extremamente sensível, tanto a variação global da flutuação (relaxação), quanto as suas variações locais em termos de quebra de simetria.

Como existe variabilidade nessa rigidez, esse parâmetro poderá ser sensível a outros tipos de potenciais que possam ser incluídos no sistema, como o potencial gravitacional.

Nosso objetivo agora é inserir o potencial gravitacional e analisar alterações causadas no modelo, o que é extremamente importante para o estudo do crescimento de cristais de proteínas em condições de microgravidade.

## 6. Referências

- [1] Fujiwara, S.; Sato, T., *Molecular Simulation*, 1999, 21:271.
- [2] Ramos, F.M.; Rosa, R.R.; Neto, C.R.; et al. “Generalized complex entropic form for gradient pattern analysis of spatio-temporal dynamics”, *Physica A*, 2000, v.283, n. 1-2, p.171-174.
- [3] Rosa, R.R.; Pontes, J.; Christov, C.I., et al. “Gradiente pattern analysis of Swift-Hohenberg dynamics: phase disorder characterization”, *Physica A*, 2000, v. 283, n.1-2, p.156-159.
- [4] Rosa, R.R.; Sharma, A.S.; Valdivia, J.A, “Characterization of asymmetric fragmentation patterns in spatially extended systems”, *Int. Journal of Modern Physics C*, 1999v. 10, n.1, p.147-163.