约束动力学中的修正 RATTLE 方法及其在模态分析中的应用

陈旻昕

摘要

在分子动力学模拟中，时间步长受限于被模拟分子中的键长伸缩和键角张合这类高频运动的周期。这使得分子动力学模拟的时间步长非常小，通常为1飞秒。约束动力学通过约束键长或键角来达到延长时间步长的目的。由于当约束所有的键角时，约束方程的个数急剧增加，现有的约束动力学算法不适用于约束键角的动力学模拟，并且其中被最广泛应用的约束动力学算法 SHAKE 和 RATTLE 求解键角约束存在收敛性问题。

在这篇论文中，我们提出一种新的约束动力学算法：修正 RATTLE 方法（M-RATTLE）。在修正RATTLE 方法中，我们引入一种新的校正所有原子位置坐标来满足约束条件的方法。这种新的校正方法理论上等价于在RATTLE 方法中计算拉格朗日乘子，从而它不会引起总能量的耗散。而且这种校正方法特别适用于一般分子的刚体动力学和只有二面角未被约束的树状结构分子。在这些情形下，未被约束的自由度的运动空间的一组基能直接被写出，从而修正RATTLE 方法只要求在每一步求解k 维的线性方程组，其中 k 是未被约束的自由度的个数。这比直接求解 m 维约束方程的传统方法的计算量要少得多，因为 k 远小于 m。我们将修正RATTLE 方法应用于吲哚分子和苯分子的刚体动力学模拟及键长和键角都被约束的丙氨酸多肽。计算效果与传统方法的比较表明修正 RATTLE 方法具有更高的效率和更好的稳定性。并且我们将修正 RATTLE 方法应用于生物大分子的正则模态分析, 提出了修正 RATTLE 子空间模态分析方法。对丙氨酸多肽和蛋白质：BPTI, 1HHP, 1VII 的计算结果表明修正 RATTLE 方法子空间正则模态分析方法能够正确地得到生物大分子的低频模态。论文的最后一部分是我们对蛋白质 alpha-t-alpha （1ABZ）的粗粒化动力学模拟的工作。

关键词: **分子动力学，约束动力学，刚体动力学，修正RATTLE 方法，正则模态分析，粗粒化动力学**。