عمليات محاكاة فائقة السرعة لأنظمة جزيئية معقدة عبر "تقطيع الجزيئات"



ناغويا–اليابان: طور البروفسور ستيفان ايرل ويوشيو نيشيموتو من معهد الجزيئات البيولوجية الانتقالية (ITbM) في جامعة ناغويا، والدكتور ديمتري فيدروف من المعهد الوطني للعلوم الصناعية والتكنولوجيا المتقدمة (AIST) في تسوكوبا، طريقة كمومية جديدة وفائقة السرعة تُمكننا من إجراء عمليات محاكاة سريعة للجزيئات التي تحتوي على أكثر من مليون ذرة دون وجود خسارة تُذكر في الدقة.

تتألف هذه الطريقة من الجمع بين النهج المداري الجزيئي التجزيئي (FMO) وطريقة الارتباط الوثيق وظيفي الكثافة (DFTB) وتُعرف الطريقة بـ FMO–DFTB وقامت هذه الطريقة وبنجاح بتقييم الجزيئات الكبيرة بما في ذلك الجزيئات البروتينية (polypeptides) وهي جزء من الحمض النووي DNA وهي عبارة عن بروتين صغير بسطح فوليريني

أوضحت الدراسة التي نُشرت في عدد 22 سبتمبر 2014 من مجلة Journal of Chemical Theory and Computation طريقة حسابية جديدة للميكانيكا الكمومية قادرة على إنجاز محاكاة سريعة وفعالة للأنظمة الجزيئية المعقدة والتي تتألف من آلاف إلى ملايين

الذرات.

يُمكن تطبيق عمليات المحاكاة التي تستخدم FMO–DFTB باستخدام مجموعة صغيرة الحجم من الـ PC، بما في ذلك الحواسيب المكتبية التي ستكون مفيدة لعلماء الأحياء والكيميائيين وعلماء المواد في دراسة تفاعلية وبنية الأنظمة الجزيئية المعقدة.

يتألف العديد من الأنظمة الجزيئية التي نواجهها في الكيمياء الحيوية والالكترونيات النانوية من عدد كبير من الذرات –يقع هذا العدد في العادة في المجال من 3^10 إلى 7^10 ذرة.

تزداد الجهود الحسابية اللازمة من أجل إجراء عمليات المحاكاة الكمومية على مثل هذه الأنظمة بشكل حاد مع زيادة حجم النظام. على سبيل المثال، إذا زاد حجم النظام بعامل 100، سيعني أن التكاليف الحسابية ستكون أكبر كلفة بحوالي بعامل يقع في المجال من مليون إلى 100 تريليون مرة إذا ما تم اعتماد هذه الطريقة؛ ولذلك، تتطلب عملية محاكاة الأنظمة الجزيئية الكبيرة في العادة تكاليف حسابية مرتفعة (متطلبات تتعلق بالجهود وبالذواكر أيضاً) وأزمنة محاكاة طويلة، ما يقود إلى طلب مرتفع جداً للحصول على طريقة دقيقة وسريعة من أجل التعامل مع مثل هذه الأنظمة.

طريقة DFTB عبارة عن نهج كمومي شبه تجريبي ويُطبق على أنظمة عضوية وبيولوجية متنوعة؛ ويقول البروفسور ستيفان ايرل وهو من يقود البحث "على الرغم من أن طريقة DFTB سريعة نسبياً، إلا أن الجهود الحسابية تزداد بشكلٍ تكعيبي بالنسبة لحجم النظام؛ ولذلك، نود الجمع بينها وبين نهج آخر من أجل تطوير طريقة يُمكنها إجراء الحسابات الكمومية الكيميائية، الخاصة بالأنظمة الجزيئية المعقدة، بشكلٍ فعال".

ركزت مجموعة ايرل على نهج FMO الذي يقوم بتقسيم النظام المعقد إلى أجزاء جزيئية ويتم تطبيقه على مجال متنوع من الأنظمة البيولوجية وغير العضوية؛ ويصف ايرل الأمر بأنه "بتطبيق الجمع الجديد بين DFTB وFMO، طورنا طريقة فريدة تُعرف بـ FMO–DFTB والتي يُمكنها أن تقوم بعمليات المحاكاة فائقة السرعة وبدون أخطاء ".

تطلبت عمليات الحساب الخاصة بنظام مائي مكون من حوالي 20,000 ذرة –والتي اعتمدت على نهج FMO–DFTB– حوالي ثلاث دقائق في حين احتاج القيام بنفس الحسابات، باستخدام الحساب الكامل بطريقة DFTB، حوالي ثلاثة أسابيع –أي زمن أطول بحوالي 10,000 مرة .

ويضيف البروفسور : "بوجود تزايد خطي تقريباً في جهد الحسابات بالنسبة لحجم النظام عند استخدام طريقة FMO–DFTB، قمنا بإنجاز تطوير عملاق على نهج DFTB ".

تُبرهن طريقة FMO–DFTB على قابليتها للتطبيق أيضاً جراء نجاحها في إجراء أمثلة لهندسة تكتل فوليريني مكون من حوالي مليون ذرة، وهو أمر يُعتقد بأنه واحد من أكبر حسابات ميكانيكية الكم التي تم إجراءها حتى الآن.

كما أضاف : "بتطويرنا لطريقة FMO–DFTB، يُمكن الآن إنجاز عمليات المحاكاة الخاصة بالأنظمة الجزيئية المعقدة على حاسب مكتبي –بعد أن كان الأمر يتطلب حواسيب فائقة من أجل القيام بذلك؛ وهو أمر سيكون مفيد بالنسبة للعديد من العاملين في حقول العلوم الجزيئية، بالإضافة إلى علماء الحساب النظري. نعمل حالياً على تطوير دقة FMO–DFTB بشكلٍ أكبر وهو أمر سيسمح لنا بالنظر إلى البنيتيدات الصناعية التي تم تطويرها في ITbM وسيسمح أيضاً باستكشاف التفاعلات التي لم نتخيل مشاهدتها في السابق".

تُفيد طريقة FMO–DFTB في تمكين عمليات المحاكاة السريعة للأنظمة الكبيرة التي كان من المستحيل سابقاً محاكاتها جراء ما تتطلبه من جهد حسابي وذواكر هائلة الحجم؛ ومن المتوقع أن تتوسع تطبيقات FMO–DFTB لتشمل مجالات متنوعة –انطلاقاً من الأنظمة الكيميائية مروراً بمسارات آليات التفاعل والأنظمة البيولوجية وتحليل تفاعلات (ligand–protein) ووصولاً إلى الالكترونيات النانوية ودراسة الانتقال الالكتروني في المواد الالكترونية.

- التاريخ: 2015–03–22
- التصنيف: فيزياء

#محاكاة #تقطيع_الجزيئات

المصادر

- Science Daily
- الورقة العلمية
- الصورة

المساهمون

- ترجمة
  - همام بيطار
- مُراجعة
  - مصطفى عبدالرضا
- تحرير
  - عبد الرحمن باعطيه
- تصميم
  - حسن بسيوني
- نشر
  - فرزت الشياح