

Estudo comparativo de diferentes métodos de ensemble generalizado em simulações computacionais de polímeros de pequenos comprimentos

J.C.O. Guerra

Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia

Resumo: Proteínas são os blocos construtores e as unidades funcionais de todos os sistemas biológicos, desempenhando funções as mais importantes. Há 20 aminoácidos naturais que a natureza usa para “fabricar” proteínas, os quais diferem-se entre si quanto ao tamanho e outras propriedades físicas e químicas. Mas, a diferença mais importante entre eles, no que diz respeito à determinação da estrutura da proteína, é sua hidrofobicidade. Uma cadeia de proteína aberta, sob condições fisiológicas, se dobrará em uma configuração tridimensional para desenvolver sua função, a qual é chamada de o estado nativo. Para proteínas globulares de domínio simples, o comprimento da cadeia é da ordem de 100 aminoácidos. A maioria das proteínas globulares de domínio simples solúvel em água é muito compacta, com uma forma aproximadamente arredondada. Um dos principais objetivos do problema de dobramento de proteínas é prever a estrutura dobrada tridimensional para uma dada sequência de aminoácidos. É claro que parâmetros ambientes de caráter físico ou físico-químico (como a temperatura e o pH) irão definir se uma dada proteína estará dobrada ou desdobrada. Contudo, a força hidrofóbica é a força diretora essencial no processo de dobramento terciário [1]. A estrutura dobrada de uma proteína funcional é termodinamicamente estável sob condições fisiológicas. Entretanto, mesmo uma pequena mudança das condições ambientes, tais como, temperatura e pH, poderá desestabilizar a fase dobrada. A desestabilização efetivamente torna a contribuição entrópica à energia livre dominante relativamente à contribuição energética levando ao decaimento do seu núcleo hidrofóbico. Isso não necessariamente significa um desdobramento globular da proteína de imediato. Uma fase conformacional intermediária compacta poderá permanecer estável. Veremos em seguida que o estudo e a compreensão do comportamento estrutural e as transições conformacionais experimentadas por polímeros e proteínas têm atraído cada vez mais atenção da comunidade científica nas últimas décadas, pela sua relevância científica e tecnológica. Tomemos o caso relevante de polímeros de pequenos comprimentos [2, 3]. Com a introdução e consequente disponibilização de técnicas experimentais de alta resolução e a demanda pela nanofabricação de aplicações moleculares, a investigação das propriedades estruturais de peptídeos sintéticos quando ancorados em substratos (metálicos ou semicondutores) tem permitido o projeto e aplicação de nanodispositivos híbridos [2]. Outro campo fascinante diz respeito ao estudo de fases conformacionais induzidas por nanofios ultra-finos atrativos, isto é, substratos com topologia unidimensional [3]. Em todos os casos,



XIX SBQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

contudo, modelos simplificados de polímeros ou proteínas são utilizados. Os chamados modelos de granulação grosseira (coarsed-grained models) são empregados desde que transições conformacionais acompanhando processos de estruturação molecular exibem similaridades com transições de fase termodinâmicas e, com isso, deve ser possível caracterizá-las por meio de um conjunto fortemente reduzido de graus de liberdade efetivos. Uma vez que a caracterização de macroestados conformacionais por espaços de parâmetros de baixíssima dimensão é possível, são introduzidas subestruturas de granulação grosseira. Nos tratamentos mais simples, apenas dois tipos de aminoácidos são introduzidos: resíduos hidrofóbicos e resíduos polares. Simulações de Monte Carlo têm sido empregadas a heteropolímeros hidrofóbico-polar de modo a investigar transições conformacionais [4] e de modo a obter-se o diagrama de fases estruturais do polímero sob diferentes condições [2, 3]. Simulações de Monte Carlo-Metropolis simplesmente não são algoritmicamente eficientes para se obter uma amostragem abrangente do espaço configuracional. Logo, técnicas de ensemble generalizado, como, por exemplo, temperamento paralelo, abordagem multicanônica, e Wang-Landau têm sido extensivamente usadas com esse propósito. Neste trabalho, pretende-se discutir e aplicar esses diferentes métodos com o objetivo de se comparar sua eficiência. Para isso, aplicaremos os diferentes métodos de ensemble generalizado a um homopolímero de granulação grosseira de diferentes comprimentos. Um parâmetro para medir a eficiência da amostragem será introduzido, o qual levará em consideração tanto o espaço configuracional varrido durante a simulação quanto o tempo de computação. Em todos os casos, quantidades de flutuação, como o calor específico, serão plotadas contra a temperatura, pois sinalizam relevantes transições conformacionais experimentadas pelo polímero. Um tal estudo é extremamente importante devido ao fato de que simulações computacionais de sistemas poliméricos possuem um custo simulacional não trivial, mesmo levando em conta um aumento das capacidades computacionais ano após ano. Assim, determinar a eficiência dos diferentes métodos de ensemble generalizados atualmente disponíveis permite à comunidade científica discernir entre os melhores métodos simulacionais presentes e, possivelmente, atuar como catalizador para que novos e mais eficientes métodos possam vir a ser projetados.

Palavras-Chave: Mecânica Estatística de Polímeros, Dobramento de Proteínas, Transição de fase, Simulações de Monte Carlo, Métodos de ensemble generalizado

Suporte: Este trabalho foi suportado pela Fapemig

Referências:

- [1] M. Bachmann, W. Janke, Proceedings of the Conference “Path Integrals – New Trends and Perspectives”, 531 (2008).
- [2] M. Bachmann, W. Janke, Physical Review Letters, 95, 058102 (2005).
- [3] T. Vogel, M. Bachmann, Physical Review Letters, 104, 198302 (2010).
- [4] M. Bachmann, Physics Procedia, 3, 1387 (2010).