

ОПТИМИЗАЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПИГМЕНТ-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ

Чесалин Д.Д., Курков В.А.¹, Шкирина У.А.², Пищальников Р.Ю.

Институт общей физики А.М. Прохорова Российской академии наук, Россия, 119991, г. Москва, ул. Вавилова, 38, genoa-and-pittsburgh@mail.ru

¹Московский физико-технический институт, Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пр., 9

²МГУ им М.В. Ломоносова, Механико-математический факультет, Россия, 119991, Ленинские горы, 1

Численное моделирование в прикладных науках (физика, химия, биология и т.д.) необходимо в случае, когда поставленная задача не может быть решена аналитическим путем. Пигмент-белковые комплексы фотосинтетических организмов, состоящие из множества молекул, являются одним из демонстративных примеров успешного применения численного моделирования и многопараметрической оптимизации. Тем не менее, продемонстрировать эффективность работы оптимизационных алгоритмов можно на более простом примере – расчет спектров поглощения каротиноидов в органических растворителях. Каротиноиды – биологические пигменты, входящие в состав пигмент-белковых комплексов. Для расчета оптического отклика каротиноидов необходимо использовать полуклассическую квантовую теорию, основанную на применении модели многомодовых броуновских осцилляторов, в которой бесконечный набор колебательных состояний молекулы аппроксимируется конечным набором вибронных мод. За основу моделирования был взят алгоритм дифференциальной эволюции, предназначенных для нахождения глобального минимума нелинейных и недифференцируемых функций от многих переменных [1]. Функцией для минимизации была выбрана функция, характеризующая несоответствие экспериментального и смоделированного спектра. Ее преимущество состоит в том, что ее нижняя граница всегда равна нулю. В случае экспериментальных данных она может быть недостижима, но при замене экспериментального спектра на синтетический полученный ноль будет свидетельствовать о полном совпадении спектров. В результате можно узнать информацию о структуре и собственных колебаниях молекулы, которую невозможно получить экспериментальным путем. Найденные параметры модели можно использовать для нахождения микропараметров среды, моделирующих взаимодействие ансамбля молекул между собой.

Литература

1. Chesalin, D.D.; Kulikov, E.A.; Yaroshevich, I.A.; Maksimov, E.G.; Selishcheva, A.A.; Pishchalnikov, R.Y. Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling // *Swarm and Evolutionary Computation* том 75, 2022, 101210, doi:10.1016/j.swevo.2022.101210.