

## СОВРЕМЕННЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА

*Каленчак Е.В.*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
г. Минск, Республика Беларусь*

*Чураков А.В. – канд. мед. Наук*

Данный тезис представляет собой обзор бесплатных современных программных средств для визуализации и моделирования атомно-молекулярной структуры вещества. Он может быть полезен для студентов и молодых ученых при написании исследовательских работ, отчетов и статей.

В середине 20-го века начали использовать математические модели, представляющие виртуальная математическая конструкция, созданная на основе экспериментальных данных и обладающая всеми свойствами реального объекта. На текущий момент, математическое моделирование используется во множестве областей, начиная с промышленного применения и заканчивая их все более активным применением в таких научно-исследовательских областях как химия и фармацевтика. Математическое моделирование позволяет с высокой точностью находить оптимальные решения, прогнозировать возможные исходы различных процессов, а также принимать наиболее эффективные решения.

Очень важным для любого моделирования является возможность визуализировать полученную модель. Для этого создаются так называемые «визуализаторы» – специализированное программное обеспечение, которое может быть, как свободным, так и проприетарным. Цель данного обзора – рассмотреть существующие программные продукты, позволяющие реализовывать графическое отображение атомно-молекулярной структурой вещества. Также, почти все существующие программные продукты для визуализации предоставляют обширные возможности для внесения изменений в химические структуры, а также создание их с нуля.

Отметим, что посредством использования визуализаторов решается сразу несколько довольно разнообразных задач [1]:

- подготовка рисунков для публикаций;
- анализ параметров структуры (измерение расстояний между атомами, углов между связями, проверка наличия пустот и т.д.);
- подготовка входных данных для других программ, выполняющих анализ или моделирование (квантовохимическое, молекулярно-механическое, поиск по базам данных и т.д.)
- анализ результатов вычислений, выполненных другими программами;
- создание и редактирование химических структур.

Не подлежит сомнению, что в основе любого химического вещества лежат атомы и связи между ними. Именно на этом базируется традиционное разделение визуализаторов на 2D и 3D. Основной фокус внимания в этой статье будет смещен в сторону свободного ПО для 3D.

Начнем рассмотрение с 2D-визуализаторов. Для отображения атомов в них используются их соответствующие символы, а связи обозначаются ребрами геометрических с различными стилями рисовки (характеризуют тип связи). Исходя из самого названия, совершенно очевидно, что данные программные продукты обладают возможностью отображать связанность атомов в искомой химической структуре, не позволяя, однако, визуализировать пространственное расположение атомов друг относительно друга, углы между связями и расстояния между атомами. Возможна отрисовка схемы реакции.

Полученное изображение получается простым и плоским, что позволяет без дополнительной обработки использовать его для печати. Как еще один вариант использования – осуществление запросов для поиска по базам данных [1]. Примерами свободного ПО могут служить JChemPaint, VKChem, Chemtool. Они полностью соответствуют вышеизложенному описанию.

Трехмерные химические визуализаторы представляют собой более сложные программные продукты и позволяют отображать не только пространственное размещение атомов, но и их связанность. Здесь могут использоваться несколько подходов к визуализации, каждый из которых обладает своими преимуществами, в зависимости от желаемой информации:

- каркас (удобно для визуализации сложных структур и молекул);
- стержни;
- шары и стержни;
- шары и стержни с уменьшенными радиусами;
- шары и стержни с уменьшенными радиусами без атомов водорода;
- сферы Ван-дер-Ваальса (для оценки пространства, свободного для других молекул).

Являя собой значительно более сложную конструкцию относительно создаваемых в 2D, приходится изменить подход к обозначению элементов. Теперь на смену условным знаком и подписям элементов приходит цветовая кодировка, что приводит одновременно к более красочным изображениям и влечет за собой обработку при черно-белой печати. По большей части все 3D-визуализаторы позволяют выполнять такие стандартные действия, как вращение, масштабирование, перемещение, измерение углов и расстояний между атомами.

Рассмотрим несколько бесплатных популярных 3D-визуализаторов, позволяющих, одновременно, и создание новых структур. Начнем с рассмотрения бесплатного и с открытым исходным доступом программного продукта Avogadro. Это современный редактор и визуализатор молекул, разработанный для использования в вычислительной химии, молекулярном моделировании, биоинформатике, материаловедении и смежных областях. Важными его преимуществами являются кроссплатформенность (поддерживает Windows, Linux и Mac OS), возможность выбора языка (китайский, французский, немецкий, итальянский, русский, испанский и др.) и подключения плагинов, основанных на Python/C++/Qt/ OpenGL.

Основной функционал программного продукта основан на возможностях Open Babel, который является свободной химической экспертной системой. Данная система разрабатывается и поддерживается сообществом учёных. Продукт является достаточно качественным образцом 3D-редакторов молекулярных структур и отличается удобным интерфейсом и простотой в изучении.

Следующая программа Gamedit представляет собой графический интерфейс пользователя для пакетов вычислительной химии Gamess-US, Gaussian, Molcas, Molpro, MPQC, PCGamess и Q-Chem. Она кроссплатформенна и позволяет отображать различные результаты расчетов, включая поддержку большинства основных форматов молекулярных файлов. Усовершенствованный Molecule Builder позволяет пользователям быстро рисовать молекулы и исследовать их в 3D. Здесь возможно автоматически сгенерировать серию изображений для анимации (вибрация, сходимости геометрии, вращение, контуры, плоскости с цветовой кодировкой).

Третья программа, которая будет рассмотрена является продуктом компании Schrödinger молекулярная графическая система со встроенным интерпретатором Python, предназначенная для визуализации в реальном времени и быстрой генерации высококачественных молекулярных графических изображений и анимаций. Надо заметить, что PyMOL является одной из малочисленных систем молекулярной визуализации с открытым исходным кодом, возможных для использования в структурной биологии. Поддерживается просмотр трёхмерных структур большинства наиболее популярных форматов (таких как \*.cml, \*.cif, \*.mol, \*.sd, \*.sdf, \*.pdb, \*.ent, \*.vis, \*.xyz и пр). PyMOL при необходимости возможно дополнить плагинами или пользовательскими скриптами.

Несмотря на то, что сам продукт является бесплатным, существует также Incentive PyMOL. Это пакетированный платный программный продукт, предоставляющий образовательный курс и некоторые иные преимущества. Образовательные подписки доступны бесплатно для студентов дневного отделения и преподавателей, обучающихся студентов дневного отделения. Существуют сведения, что четверть всех публикуемых в научной литературе изображений структур белков сделана с помощью PyMOL.

Последней программой, рассмотренной в этом обзоре, будет Gromacs, являющийся изначально разработкой команды Германа Берендсена, из отделения биофизической химии университета Гронингена. В настоящее время развивается и поддерживается усилиями энтузиастов. Представляет он из себя пакет программ, используемый для молекулярно-динамического моделирования и позволяющих проводить анализ полученных моделей. Основной областью его применения является моделирование биомолекул (например, молекул белков, липидов, нуклеиновых кислот и т.д.), обладающих множеством взаимодействий между атомами. Также, поскольку GROMACS очень быстро вычисляет несвязанные взаимодействия (которые обычно преобладают в симуляции), многие используют его для исследования небологических систем, например, полимеров.

GROMACS обеспечивает чрезвычайно высокую производительность по сравнению со всеми другими программами, что отмечают все его пользователи. Нельзя не отметить существование множества проверок на непротиворечивость, которые выдают четкие сообщения об ошибках, если что-то идет не так. Как бонус, пакет включает в себя полностью автоматизированный построитель топологии для белков, даже мультимерных структур.

Хочется отметить тот факт, что все четыре рассмотренных программы входят в ТОП-15 лучших химических программных сред с открытым программным кодом для Linux [2]. Также туда была включена упомянутая выше программа для 2D-визуализации VChem.

В заключение следует отметить, что все рассмотренные в обзоре программные среды позволят молодому ученому, не затратив лишних средств, провести сразу комплекс мероприятий: моделирование структуры, ее анализ, а также подготовка, интерпретация и качественная визуализацию результата. Ко всему прочему, все среды являются кроссплатформенными и поддерживают стандартные для химического моделирования форматы, что позволят продолжить дальнейшую работу в иных программных средах.