

Métodos para discretização da superfície excludente do solvente (SES)

Felipe Augusto da Silva¹

Departamento de Matemática, Mestrado em Modelagem Matemática e Computational,
Instituto de Ciências Exatas, UFRRJ, Seropédica, RJ

Duílio Tadeu da Conceição Jr.²

Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática, UFRRJ, Seropédica, RJ

Clarissa Oliveira da Silva³

Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química, UFRRJ, Seropédica, RJ

Resumo. O presente trabalho objetiva descrever a estratégia e os procedimentos já realizados para a discretização da superfície excludente do solvente (SES), necessária para cálculos numéricos relacionados a modelos de solvatação em meios contínuos.

Palavras-chave. Modelos Contínuos de Solvatação, Equações Integrais, Métodos com Elementos de Contorno, GMSH, Moving Least-Squares.

1 Introdução

Dentre os modelos relacionados à solvatação, aqueles que descrevem o solvente como um meio contínuo [4] apresentam a vantagem de reduzir a quantidade de termos da Hamiltoniana que descreve a interação entre soluto e solvente. A energia de solvatação total do sistema, que tem status de uma energia livre M , é normalmente definida como a soma de quatro termos, além das contribuições relacionadas aos movimentos térmicos.

$$G(M) = G_{cav} + G_{el} + G_{dis} + G_{rep} + G_{tm} \quad (1)$$

A primeira etapa desse processo está relacionada com a formação, no solvente puro, de uma cavidade vazia com capacidade para acomodar o soluto (G_{cav}). A componente eletrostática (G_{el}) é determinada por uma função de polarização $\vec{P}(\epsilon, \vec{E})$, onde o campo elétrico \vec{E} é determinado pelas cargas aparentes localizadas sobre a superfície da cavidade e cujos valores são obtidos a partir da solução numérica [1] de equações integrais [3].

¹fasnik@gmail.com

²duiliotadeu@gmail.com

³clarissa-dq@ufrj.br

2 Metodologia

A solução de tais equações é dividida em duas etapas:

- 1) a definição da delimitação entre a região molecular e aquela do solvente, a partir da geometria da molécula e;
- 2) a determinação de grandezas relacionadas ao solvente e a discretização dessa região em um número finito de pequenas partições chamadas de tesseras.

Dentre as regiões que podem ser definidas, a chamada superfície excludente do solvente (SES) representa a região formada pelo conjunto de pontos tangentes descritos pelo rolar de uma porção esférica do solvente sobre a superfície de van der Waals [4]. Um exame sobre os métodos para discretização da SES existentes (MSDOT, DefPol, BLMOL [4]) aponta dificuldades práticas assim como problemas de estabilidade numérica.

Neste trabalho é proposta uma metodologia para a discretização da SES através da descrição dos objetos geométricos que definem a SES e um gerador de malha para superfícies, como GMSH [2]. Outra metodologia também proposta consiste em criar um conjunto de pontos sobre a SES e, a partir destes pontos, obter uma malha triangular com algoritmos baseados em Moving Least-Squares [5].

Agradecimentos

Agradeço aos meus orientadores e colegas de mestrado por todo apoio prestado.

References

- [1] C.A. Brebia and J. Dominguez, Boundary elements an introductory course - Second Edition. WTI Press, (1992).
- [2] C.Geuzaine and J. Remacle, Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, Int. J. Numer. Meth. Engng., vol. 79,1309-1331, (2009)
- [3] W. Hackbusch, Integral Equations - Theory and Numerical Treatment, Birkhauser Verlag, (1995).
- [4] B. Mennucci and R. Cammi, Continuum Solvation Models in Chemical Physics - From Theory to Applications, John Wiley & Sons, Cap 1-3, (2007).
- [5] C.E. Scheidegger, S. Fleishman and C.T. Silva, Triangulating Point Set Surfaces with Bounded Error, SGP'05 Proceeding of the third Eurographics symposium on Geometry processing, Art. 63, (2005).