БИОФИЗИКА, 2019, том 64, вып. 2, с. 239–242

МОЛЕКУЛЯРНАЯ БИОФИЗИКА

УДК 577.3

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ, ВКЛЮЧАЮЩИЙ ФУРЬЕ-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ (РАЗЛОЖЕНИЕ ПО ПЛОСКИМ ВОЛНАМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТ), ПОЗВОЛЯЮЩИЙ ОДНОВРЕМЕННО ИССЛЕДОВАТЬ СЛОЖНЫЕ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ, В ТОМ ЧИСЛЕ ПОВОРОТЫ И СМЕЩЕНИЯ В СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

© 2019 г. А.В. Батяновский, В.А. Намиот*, И.В. Филатов, Н.Г. Есипова***, И.Д. Волотовский**

Институт биофизики клетки и клеточной инженерии НАН Беларуси, 220072, Минск, ул. Академическая, 27

**Институт ядерной физики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1/2*

***Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный Московской области, Институтский пер., 9*

****Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, 119991, Москва, ул. Вавилова, 32*

E-mail: suner_s@mail.ru

Поступила в редакцию 22.11.18 г.
После доработки 13.12.18 г.
Принята к публикации 20.12.18 г.

Предложен своего рода «комбинированный» математический подход, позволяющий рассматривать Фурье-объекты, возникающие при описании макромолекул, в сферических координатах. Применение сферических координат допускает сравнительно простое выявление тех или иных симметрий, которые могут иметь место в макромолекулах. Кроме того, подобный подход, в котором используются разложения плоских волн (вводимых для описания макромолекул) в ряд по сферическим функциям, позволяет рассматривать одновременно и повороты, и смещения макромолекулы как целого в пространстве.

Ключевые слова: Фурье-преобразование, макромолекула, плоские волны, сферические функции, дальнодействующие взаимодействия, молекулярное узнавание.

DOI: 10.1134/S0006302919020030

Как известно, для полного описания «устройства» макромолекулы нужно в принципе знать координаты всех входящих в нее атомов. Но для многих задач [1–6], таких, например, которые встречаются в молекулярной динамике или же при вычислении потенциалов взаимодействия макромолекул друг с другом, столь подробная информация является даже избыточной. Для таких задач вполне достаточно знания локальной плотности заряда как функции координат. Задать же подобные функции в явном виде можно в виде разложений по комбинациям различных специальных функций. При этом желательно выбирать такие специальные функции, которые позволяют относительно легко рассматривать движения макромолекулы как целого. К подобным движениям относятся перемещения макромолекулы в пространстве и ее повороты. Но в то время как для описания поворотов удобнее всего использовать всевозможные сферические специальные функции, для описания смещений макромолекул как целого (т.е. для параллельного переноса макромолекулы в пространстве без ее поворотов) удобнее всего применять обычное Фурье-преобразование, основанное на использовании плоских волн вида $e^{i\vec{k}\vec{r}}$. В тех же случаях, когда требуется рассматривать одновременно и повороты, и смещения, возникает необходимость в своего рода «комбинированном» математическом подходе, в котором приходится использовать разложения плоских волн по сферическим гармоникам.

На сегодняшний день существует ряд работ по представлению макромолекулярных объектов (точнее, функций, характеризующих эти объекты) в виде разложений по комбинациям различных специальных функций – полиномов Лежандра, различных вариаций функций Лагера, полиномов Цернике и так далее. Подобные разложения нередко продолжают именовать Фурье-преобразованиями, хотя очень сомнительно, что их можно каким-либо образом свести к обычному Фурье-преобразованию:

$$g(\mathbf{k}) = \int f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}. \tag{1}$$

Уместно выразить определенный критицизм по поводу подобного произвола, вытекающий из простых интуитивных соображений. Во-первых, в таких случаях надо быть осторожным в отношении математических свойств таких разложений, в том числе при операциях свертки. Во-вторых, в таких разложениях нарушается соотносимость друг с другом различных координат, и преобразования пространства в таких случаях могут приводить к искажениям результатов разложений.

В настоящей статье предлагается вниманию читателя искомый вывод представления Фурье-объектов в сферических координатах, полученный из предположения возможности представления исходной функции в виде разложения по сферическим гармоникам.

Исходим из частного случая гегенбауэровского обобщения интеграла Пуассона, взяв $\nu = 1/2$ [7]:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\int_0^{\pi} e^{iz\cos(\varphi)}P_n(\cos(\varphi))\sin(\varphi)d\varphi, \tag{2}$$

где $J_{n+\frac{1}{2}}$ – функция Бесселя полуцелого порядка.

Первая часть доказательства проведена подобно тому, как это используется в работе [7] для доказательства двойного интеграла Гегенбауэра типа Пуассона. Рассмотрим очевидное следствие этого интеграла:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\int_0^{\pi} e^{iz\cos(\theta)} \times \\ \times P_n(\cos(\theta))\sin(\theta)d\theta\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\sin^0(\varphi)d\varphi. \tag{3}$$

В качестве следующего шага, рассматривая угловые координаты как широту и долготу, с переходом в декартовую систему координат и обозначением направляющих косинусов вектора интегрирования как $L = \cos(\varphi)\sin(\theta)$, $M = \sin(\varphi)\sin(\theta)$, $N = \cos(\theta)$, а также учитывая, что элемент поверхности $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi$, запишем:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\iint\limits_{M \geq 0} e^{izN}P_n(N)M^0 d\Omega.$$

Проведя циклическую перестановку ортов, получим:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\iint\limits_{N \geq 0} e^{izL}P_n(L)N^0 d\Omega,$$

или

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{2\pi} e^{iz\cos(\varphi)\sin(\theta)} \times \\ \times P_n(\cos(\varphi)\sin(\theta))\sin(\theta)d\varphi d\theta. \tag{4}$$

Учитывая, что в выражении (4) один из интегралов охватывает полный период подынтегральной функции по координате φ, можем записать его следующим образом:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{2\pi} e^{iz\cos(\varphi - k_\theta)\sin(\theta)} \times \\ \times P_n(\cos(\varphi - k_\theta)\sin(\theta))\sin(\theta)d\varphi d\theta, \\ J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \times \\ \times \sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{2\pi} e^{iz(\cos(\varphi)\cos(k_\theta) + \sin(\varphi)\sin(k_\theta))\sin(\theta)} \times \\ \times P_n((\cos(\varphi)\cos(k_\theta) + \\ + \sin(\varphi)\sin(k_\theta))\sin(\theta))\sin(\theta)d\varphi d\theta. \tag{5}$$

И теперь, снова повторяя предыдущие операции по циклической перестановке ортов, получим:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\iint\limits_{N \geq 0} e^{iz(L\cos(k_\theta) + M\sin(k_\theta))} \times \\ \times P_n(\cos(k_\theta)L + \sin(k_\theta)M)d\Omega,$$

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\iint\limits_{M \geq 0} e^{iz(N\cos(k_\theta) + L\sin(k_\theta))} \times \\ \times P_n(\cos(k_\theta)N + \sin(k_\theta)L)d\Omega,$$

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = \tag{6}$$

$$= (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{\pi} e^{iz(\cos(\theta)\cos(k_\theta) + \sin(\theta)\sin(k_\theta)\cos(\varphi))} \times$$

$$\times P_n((\cos(\theta)\cos(k_\theta) +$$

$$+ \sin(\theta)\sin(k_\theta)\cos(\varphi))\sin(\theta)d\varphi d\theta.$$

Воспользуемся на данном этапе теоремой суммирования сферических гармоник, точнее, ее следующим видом:

$$P_n(\cos(\theta_1)\cos(\theta_2) + \sin(\theta_1)\sin(\theta_2)\cos(\varphi)) = \tag{7}$$

$$= \sum_{m=-n}^{n}(-1)^m P_n^{-m}(\cos(\theta_1))P_n^m(\cos(\theta_2))\cos(m\varphi),$$

где P_n^m – обобщенный полином Лежандра.

В итоге можно записать следующее выражение:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{\pi} d\varphi d\theta\sin(\theta) \times \tag{8}$$

$$\times e^{iz(\cos(\theta)\cos(k_\theta) + \sin(\theta)\sin(k_\theta)\cos(\varphi))} \times$$

$$\times \sum_{m=-n}^{n}(-1)^m P_n^m(\cos(\theta)P_n^{-m}(\cos(k_\theta))\cos(m\varphi)).$$

Вынеся суммирование и множители, содержащие независимые переменные, за знак интеграла и используя формулы Эйлера, получаем:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n\sqrt{\frac{z}{2\pi}}\frac{1}{\pi}\sum_{m=-n}^{n}P_n^{-m}(\cos(k_\theta))e^{-imk_\varphi} \times \tag{9}$$

$$\times (-1)^m\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi}\sin(\theta)e^{iz(\cos(\theta)\cos(k_\theta) + \sin(\theta)\sin(k_\theta)\cos(\varphi - k_\varphi))} \times$$

$$\times P_n^m(\cos(\theta))e^{im\varphi}.$$

При этом $P_n^m(\cos(\theta))e^{m\varphi}$ и $P_n^{-m}(\cos(\theta))e^{-mk_\varphi}$ – это сферическая функция и комплесно-сопряженная ей, правда, без нормировки. В результате сравнения выражений (9) и (10), являющихся непосредственно выражением Фурье-преобразования (1) в сферических координатах, способ выражения Фурье-объектов в сферической системе координат выявляется в виде разложения по комбинациям сферических функций и функций Бесселя полуцелого порядка:

$$F(k_r, k_\theta, k_\varphi) = \int\limits_0^{\infty} r^2 dr\int\limits_0^{\pi}\sin(\theta)d\theta \times \tag{10}$$

$$\times \int\limits_0^{2\pi} e^{-2\pi iz(\cos(\theta)\cos(k_\theta) + \sin(\theta)\sin(k_\theta)\cos(\varphi - k_\varphi)} f(r, \theta, \varphi)d\varphi,$$

где $f(r, \theta, \varphi)$ – исходная функция в сферических координатах, $F(k_r, k_\theta, k_\varphi)$ – ее Фурье-образ вектором частот, выраженным опять же в сферических координатах.

В представленном выводе используются несколько более общие представления о функции Бесселя, чем бытующие представления, в которых используются возможности разложения $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ по комбинациям соответствующих функций [8]. Результат при этом оказывается идентичным, хотя для случая разложения по плоским волнам требуется, кроме приведения к форме Фурье-преобразования, еще и использование свойств ортогональности сферических гармоник и функций Бесселя. Из соотношений, подобных представленному выводу, можно упомянуть варианты, описанные в работах [9,10]. Но в этих работах не полностью учитываются угловые координаты и рассмотрение ограничено лишь случаями, в которых исходные функции зависят только от радиуса, что в результате приводит лишь к нулевому члену разложения.

Надо отметить, что Фурье-преобразование в сферических координатах – на самом деле существенно более обширная тема, чем та ее часть, которая рассмотрена в данном исследовании. Существуют, к примеру, и неявные численные методы вычисления радиальной функции Фурье-разложения в сферических координатах совместно с комбинацией все тех же сферических гармоник через зональные функции или сферические радиальные ядра (spherical radial kernels) [11]. Способы быстрых вычислений связанных с такого рода преобразованиями, различающиеся по применению и реализации, можно найти в работах [11,12].

В итоге отметим, что приведенные в настоящей работе аналитические выражения, позволяющие разлагать плоские волны по сферическим функциям, могут быть эффективно использованы при описании плотности заряда в макромолекулах, что необходимо при решении задач молекулярного узнавания глобулярными биополимерами и конструирования макромолекулярных структур. Подобные разложения оказываются очень удобными, в частности, при одновременном рассмотрении поворотов и вращений в пространстве.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-54-00037-Бел) и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Б18Р-268).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. W. R. Taylor, J. Heringa, F. Baud, and T. P. Flores, Prot. Eng. **15** (2), 79 (2002).
2. S. M. Saberi Fathi, D. T. White, and J. A. Tuszynski, Proteins **82** (10), 2756 (2014).
3. L. Mavridis and D. W. Ritchie, in *Pac. Symp. Biocomput*. (2010), pp. 281–292.
4. D. Kozakov, R. Brenke, S. R. Comeau, and S. Vajda, Proteins **65** (2), 392 (2006).
5. В. А. Намиот, Биофизика **48** (3), 389 (2003).
6. C. Bajaj, R. Chowdhury, and V. Siddavanahalli, IEEE/ACM Trans. Comput. Biol. Bioinform. **8** (1), 45 (2011).
7. G. N. Watson, *A treatise on the theory of Bessel functions* (University Press, Cambridge, 1922).
8. Q. Wang, O. Ronneberger, and H. Burkhardt, *Fourier Analysis in Polar and Spherical Coordinates. Technical Report 1* (IIF-LMB, Computer Science Department, University of Freiburg, 2008).
9. W. G. Faris, *Radial functions and the Fourier transform: Notes for Math. 583A*, *Fall 2008* (Department of Mathematics, University of Arizona, 2008).
10. J. Bell, *The Fourier transform of spherical surface measure and radial functions* (jordan.bell@gmail.com, Department of Mathematics, University of Toronto, 2015).
11. J. Keiner, *Fast Spherical Fourier Transforms and Applications. Diplomarbeit im Rahmen des Informatik-Hauptstudiums* (Institut fur Mathematik, Lübeck, 2005).
12. S. Sajjabi, *Step by Step in Fast Protein-Protein Docking Algorithms. Dissertation for Fulfillment for the Doctoral Degree* (Institut fur Mathematik, Lübeck, 2014).

A Mathematical Approach that Includes the Fourier Transform (Plane Waves Decomposition Using Spherical Coordinates) for the Study of Simultaneously Complex Movements in Particular Rotations and Displacements in Complicated Molecular Constructions

A.V. Batyanovskii*, V.A. Namiot, I.V. Filatov***, N.G. Esipova****, and I.D. Volotovskii***

**Institute of Biophysics and Cell Engineering, National Academy of Sciences of Belarus, ul. Akademicheskaya 27, Minsk, 220072 Belarus*

***Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Leninskie Gory 1/2, Moscow, 119991 Russia*

****Moscow Institute of Physics and Technology, Institutskiy per. 9, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700 Russia*

*****Engelhardt Institute of Molecular Biology, Russian Academy of Sciences, ul. Vavilova 32, Moscow, 119991 Russia*

We propose a “multimodal” mathematical approach. This approach allows us to consider the Fourier-objects arising from the description of macromolecules in spherical coordinates. The use of spherical coordinates allows for a relatively simple identification of certain symmetries that may occur in macromolecules. In addition, it is possible with this approach that performs plane wave decomposition (intended to describe macromolecules) in a series of spherical functions to consider rotations and displacements of the macromolecule simultaneously as a whole in space.

Keywords: Fourier transform, macromolecule, plane waves, spherical functions, long range interactions, molecular recognition