

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Компьютерное моделирование молекулярной динамики ФТД.Б.6

Направление подготовки: 050100.68 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Образование в области физики

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Мокшин А.В. , Хуснутдинов Р.М.

**Рецензент(ы):**

Сафаров Р.Х.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2013

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) заведующий кафедрой, к.н. (доцент) Мокшин А.В. кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов научно-педагогическое отделение , Anatolii.Mokshin@kpfu.ru ; доцент, к.н. (доцент) Хуснутдинов Р.М. кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов научно-педагогическое отделение , Ramil.Khusnutdinov@kpfu.ru

### **1. Цели освоения дисциплины**

Целью преподавания дисциплины "Компьютерное моделирование молекулярной динамики" является ознакомление студентов с задачами моделирования физических процессов и явлений, первоначальном ознакомлении студентов с рядом основных вычислительных методов, применяемых при решении физических задач и при обработке данных эксперимента, способами их оптимальной реализации на компьютере, оценками погрешности результата проводимых расчетов, формирование практических навыков программирования основных математических алгоритмов применяемых при моделировании физических явлений.

Задачи изучения дисциплины - получение практических навыков программирования основных математических алгоритмов применяемых при моделировании физических явлений. Такие навыки являются крайне важной частью в системе современной подготовки физиков в современных условиях развития компьютерной техники в свете возможности ее использования непосредственно в физическом эксперименте, а также при создании численной модели реального физического явления.

### **2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования**

Данная учебная дисциплина включена в раздел " ФТД.Б.6 Факультативы" основной образовательной программы 050100.68 Педагогическое образование и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Компьютерное моделирование молекулярной динамики" является одной из основных в блоке дисциплин профильной подготовки магистров. Она базируется на дисциплине "Решение физических задач на ЭВМ" (М.2.2/3.в.1), фактически является ее логическим продолжением и углублением. Акцент в ней делается на компьютерно-ориентированные вычислительные задачи. Это алгебраические, графические, геометрические и тригонометрические, профессионально направленные (с политехническим содержанием), а также проблемно-поисковые и творческие задачи, способствующие развитию как аналитического, так и логического мышления, смекалки и способностей студентов к творческому поиску. В век высоких скоростей, космических полетов, ядерной энергетики такие задачи имеют важное воспитательное значение. В условиях дефицита времени их можно решать только с помощью компьютера. Задачи на моделирование, компьютерно-ориентированные вычислительные задачи позволяют показать физику как научную основу НТР, подчеркнуть ее прикладные вопросы по основным направлениям НТП, связать физику с жизнью, производством, сельским хозяйством.

Дисциплина представляет собой фундаментальный и целостный курс, единый в своих разделах и демонстрирующий роль численных методов при решении физических задач с применением современных информационных и компьютерных технологий. Предлагаемые компьютерные модели вбирают в себя большое число аспектов моделируемой физической реальности. Моделирование персонифицирует личность студента как исследователя. В пределах, предусмотренных программой, компьютер позволяет управлять процессом. Вводить в него случайные события, величины и факторы, моделировать творческие процессы, видеть последствия принимаемых решений, повторять ход решения, т.е. вновь проводить имитацию до получения верного результата.

### **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля**

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-4 (общекультурные компетенции)	способность формировать ресурсно-информационные базы для решения профессиональных задач. Знать: общие понятия о ресурсно-информационных базах для решения профессиональных задач, связанных как с научными исследованиями в области физики, так и в области методики преподавания физики Уметь: формировать ресурсно-информационные базы для решения профессиональных задач Владеть: соответствующим понятийным, физико-математическим аппаратом
ОК-5 (общекультурные компетенции)	способность самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе, в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности. Знать: основные концепции, связанные с информационными технологиями в области физико-математического образования Уметь: использовать информационные технологии, а также новые знания и умения в областях, не связанных со сферой физических исследований и физико-математического образования Владеть: способностью самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способность применять современные методики и технологии организации и реализации образовательного процесса на различных образовательных ступенях в различных образовательных учреждениях. Знать: современные методики и технологии организации и реализации образовательного процесса на различных образовательных ступенях в образовательных учреждениях Уметь: практически применять методы и технологии современного физико-математического образования Владеть: навыками тестирования, апробации и использования методов и технологий физико-математического образования в различных образовательных учреждениях
ПК-2 (профессиональные компетенции)	готовность использовать современные технологии диагностики и оценивания качества образовательного процесса. Знать: общие понятия, алгоритмы и методы диагностики и оценивания качества образовательного процесса Уметь: осуществлять мониторинг качества образовательного процесса Владеть: методами анкетирования, тестирования, оценки знаний, умений и навыков студентов
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способность руководить исследовательской работой обучающихся. Знать: методы, концепции и подходы организации исследовательской работы обучающихся Уметь: ставить актуальные исследовательские задачи и выполнять соответствующий контроль Владеть: навыками руководства исследовательской работой обучающихся

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Основные физические явления, модели и эксперименты; Методы физических исследований и измерений; Источники погрешностей и их классификацию; Физические принципы, законы и теории; Связь физики с другими науками, в частности с вычислительной математикой и техникой; Основные численные методы решения задач и обработки результатов измерений. Различные языки программирования и стандартные программы Microsoft Office.

2. должен уметь:

Выявлять существенные признаки физических явлений; Формулировать основные физические законы; Применять для описания физических явлений известные физические модели; Строить математические модели для описания простейших физических явлений; Описывать физические явления и процессы, используя научную терминологию; Обрабатывать результаты измерений с помощью программы "Stat graphics", Анализировать экспериментальные данные в программном пакете "Statistica", Представлять различными способами физическую информацию; Решать задачи вычислительной физики; Владеть методом размерностей для выявления функциональной зависимости; Применять знание физических теорий для анализа незнакомых физических ситуаций; Структурировать физическую информацию, используя научный метод исследований.

3. должен владеть:

Измерения основных физических величин; Определения погрешностей измерений; Грамотного использования физического и математического научного языка; Оценки результатов простейших физических экспериментов; Численных расчетов физических величин при решении задач и обработке результатов; Представления физической информации различными способами: (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, схематической, образной, алгоритмической формах).

-способен использовать базовые знания и навыки управления информацией для решения исследовательских профессиональных задач.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.	1	1	2	0	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.	1	2	4	0	0	
3.	Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.	1	3	4	2	0	домашнее задание
4.	Тема 4. Учет влияния внешней среды. Термостаты.	1	4	6	0	0	домашнее задание
5.	Тема 5. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.	1	5	6	0	0	
6.	Тема 6. Моделирование биологических мембран.	1	6	2	2	0	
7.	Тема 7. Силовое разворачивание белковых глобул.	1	7	4	0	0	
8.	Тема 8. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.	1	8	2	2	0	домашнее задание
9.	Тема 9. Зачет	1	9	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	зачет
	Итого			30	6	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Введение. Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Введение. Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.

**Тема 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.**



**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.

**Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.

**Тема 4. Учет влияния внешней среды. Термостаты.**

**лекционное занятие (6 часа(ов)):**

Учет влияния внешней среды. Термостаты.

**Тема 5. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.**

**лекционное занятие (6 часа(ов)):**

Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.

**Тема 6. Моделирование биологических мембран.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Моделирование биологических мембран.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Моделирование биологических мембран.

**Тема 7. Силовое разворачивание белковых глобул.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Силовое разворачивание белковых глобул.

**Тема 8. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Силовое разворачивание белковых глобул.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.

**Тема 9. Зачет**

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.	1	1	подготовка домашнего задания	8	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.	1	3	подготовка домашнего задания	12	домашнее задание
4.	Тема 4. Учет влияния внешней среды. Термостаты.	1	4	подготовка домашнего задания	10	домашнее задание
8.	Тема 8. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.	1	8	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
	Итого				36	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Применяемые образовательные методы и формы проведения занятий:

Проведение лекций в виде компьютерных презентаций и обсуждение материала по теме.

Проведение контрольных работ и выполнение заданий по курсу.

Лекционные и практические занятия построены с применением компьютерной презентации, решения задач с привлечением данных реальных экспериментов. В часы практических занятий проводятся контрольные работы и опросы, что дает возможность оценить усваиваемость материала студентами и при необходимости подробно остановиться на проблемных вопросах.

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

### Тема 1. Введение. Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.

домашнее задание , примерные вопросы:

Моделирование молекулярной динамики. Пространственные и временные масштабы.

### Тема 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.

### Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.

домашнее задание , примерные вопросы:

Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Численное интегрирование уравнений движения.

### Тема 4. Учет влияния внешней среды. Термостаты.

домашнее задание , примерные вопросы:

Учет влияния внешней среды. Термостаты.

### Тема 5. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.



## **Тема 6. Моделирование биологических мембран.**

## **Тема 7. Силовое разворачивание белковых глобул.**

## **Тема 8. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами. Перспективы развития молекулярных технологий.

## **Тема 9. Зачет**

## **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

По текущему контролю успеваемости:

тематика контрольных работ:

- Генерация случайных чисел.
- Метод конечных разностей. Решение дифференциальных уравнений.
- Метод Монте-Карло.
- Метод молекулярной динамики.

1. Моделирование молекулярной динамики, идейные основы и возможности компьютерной реализации.
2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий.
3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация (алгоритмы: Верле, leap-frog Верле, скоростной Верле).
4. Моделирование динамики конденсированных систем. Периодические граничные условия.
5. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий. Оценка быстродействия.
6. Алгоритм сканирования для нахождения ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Оценка быстродействия.
7. Температура. Термостатирование молекулярной системы (масштабирование скоростей; термостат Берендсена; термостат Нозе-Гувера; стохастическая динамика; столкновительный термостат).
8. Учет растворителя. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика.
9. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.
10. Моделирование макромолекулы в гидродинамическом потоке.
11. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
12. Молекулярная динамика белков. Примеры постановка вычислительных экспериментов.
13. Учет геометрических связей. Уравнения движения изолированной полимерной цепи.
14. Вычисление кулоновских сил.
15. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные автокорреляционные функции. Коэффициенты переноса.
16. Методика проведения молекулярно-динамических расчетов с биомембранами.
17. Моделирование силового разворачивания белковой глобулы.
18. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами.

### **7.1. Основная литература:**

1. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 385p.
2. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press, 1997. 400 p.
3. Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. Academic Press. 1996. 443 p.

4. McCammon J.A., Harvey S.C. Dynamics of proteins and nucleic acids. Cambridge Univ. Press, N.-Y., 1987.
5. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. "Наука", М., 1990.
6. Метод молекулярной динамики в физической химии. (Ред. Ю.К. Товбин). М.: Наука, 1996. -334 с.
7. Карплус М., Мак-Каммон Дж.Э. Динамика белковой структуры. В мире науки. 1986. ♦6. С.4-15.
8. Берлин Ал.Ал., Балабаев Н.К. Имитация свойств твердых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования. Соросовский образовательный журнал. 1997. ♦11. С.85-92.
9. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., Di Nola A., Haak J.R. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath. J. Chem. Phys. 1984. V.81.P.3684-3690.
10. Lemak A.S., Balabaev N.K. On the Berendsen thermostat. Molecular Simulation. 1994, V.13. P.177-187.
11. Lemak A.S., Balabaev N.K. A comparison between collisional dynamics and Brownian dynamics. Molecular Simulation. 1995, V.15. P. 223-231.
12. Голо В.Л., Шайтан К.В. Биофизика. Динамический аттрактор в термостате Берендсена и медленная динамика биомакромолекул. 2002. Т.47. ♦4. С.611-617.

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Alder B.J., Wainwright T.E. Phase transition for a hard sphere system. -J. Chem. Phys., 1957, v.27, No.5, p.1208-1209.
2. Балабаев Н.К., Гривцов А.Г., Шноль Э.Э. Численное моделирование движения линейной полимерной цепи. -Докл. АН СССР, 1975, т.220, N5, с.1096-1098; - Препринт ИПМ АН СССР, 1972, N 4.
3. McCammon J.A., Wolynes P.G., Karplus M. Dynamics of folded proteins. -Nature, 1977, v.267, p.585-590.
4. Henry E.R., Eaton W.A., Hochstrasser R.M.. Molecular dynamics simulations of cooling in laser-excited heme proteins. -Proc. Natl. Acad. Sci. USA, v.83, p.8982-8986.
5. Gotlib Yu.Ya., Balabaev N.K., Darinskii A.A., Neelov I.M.. Investigation of local motions in polymers by the method of molecular dynamics. -Macromolecules, 1980, v.13, p.602-608.
6. Brooks B.R., Brucoleri R.E., Olafson B.D., States D.J., Swaminathan S., Karplus M. CHARMM: A program for macromolecular energy minimization, and dynamics calculations. - J. Comput. Chemistry, 1983, v.4, No.2, p.187-217.
7. P.K.Weiner, P.A.Kollman. AMBER: Assisted Model Building with Energy Refinement. A general program for modeling molecules and their interactions.-J. Comput. Chem., 1981, v.2, No.3, p.287-303.
8. Балабаев Н.К., Лемак А.С. Молекулярная динамика линейного полимера в гидродинамическом потоке. Ж. Физ. Химии, 1995. Т.69. С.28-32.
9. Lemak A.S., Balabaev N.K. Molecular dynamics simulation of polymer chain in solution by collisional dynamics method. J. Comput. Chem. 1996. V.17. P.1685-1695.
10. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка: Курс лекций с цветными и стереоскопическими иллюстрациями и задачами. - 3 изд., испр. и доп. -М.: КДУ, 2005 - 456с.
11. Балабаев Н.К., Лемак А.С., Шайтан К.В. Молекулярная динамика и электронно-конформационные взаимодействия в ферредоксине. // Мол.биол., 1996, 30, 1348-1356.

## 7.3. Интернет-ресурсы:

- Учебно-методические материалы - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8514](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8514)  
Учебно-методические материалы кафедры ВФ - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8515](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8515)  
Учебные материалы - [http://kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8514](http://kpfu.ru/main_page?p_sub=8514)

Учебные материалы. - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8514](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8514)

Электронно-образовательные ресурсы - [http://www.kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=8515](http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=8515)

### **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Освоение дисциплины "Компьютерное моделирование молекулярной динамики" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 050100.68 "Педагогическое образование" и магистерской программе Образование в области физики .

Автор(ы):

Мокшин А.В. \_\_\_\_\_

Хуснутдинов Р.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Сафаров Р.Х. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.