

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



УТВЕРЖДАЮ

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

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Компьютерные технологии и в биологии. Программирование и математическое моделирование
М1.Б.1

Направление подготовки: 020400.68 - Биология

Профиль подготовки: Информационные технологии в фармакологии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Акберова Н.И.

Рецензент(ы):

-

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань

2014

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) доцент, к.н. (доцент) Акберова Н.И. кафедра биохимии ИФМиБ отделение фундаментальной медицины , Natasha.Akberova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

- 1) ознакомление с современными достижениями в области компьютерного моделирования динамики биомолекулярных объектов и систем;
- 2) обучение владению современными методами молекулярного моделирования биоструктур.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.Б.1 Общенаучный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Общенаучный цикл М.1.В1, (магистерская программа "Биохимия и молекулярная биология"). Семестр 10.

В начале курса студент должен иметь достаточные знания в области клеточной биологии, биохимии, биофизики, молекулярной биологии в объеме программы бакалавриата биологии.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

В результате освоения дисциплины студент:

представления, лежащие в основе моделирования молекулярной динамики; возможности компьютерной реализации; базовые алгоритмы для нахождения межмолекулярных взаимодействий и численного интегрирования уравнений движения молекулярной системы; примеры постановок и использованных технологий при проведения вычислительных экспериментов с биоструктурами; примеры вычислительных экспериментов с белками; место и роль молекулярного моделирования биоструктур в биологии.

методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования биоструктур.

проводить расчеты для модельных молекулярных систем с использованием различных программных средств; проводить обработку результатов молекулярно-динамических расчетов.

навыки использования вычислительных методов и уметь использовать эти методы в планировании и осуществлении вычислительных экспериментов.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен во 2 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. Основы моделирования молекулярной динамики	10	1-3	0	0	0	
2.	Тема 2. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды	10	4-5	0	0	0	
3.	Тема 3. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами	10	6-8	0	0	0	
4.	Тема 4. Программное обеспечение молекулярного моделирования биоструктур	11	1-8	0	0	0	
5.	Тема 5. Проведение НИР - Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы.	11	8-13	0	0	0	
6.	Тема 6. Аттестация	11	13	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	экзамен
	Итого			0	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основы моделирования молекулярной динамики

Тема 2. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды

Тема 3. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами

Тема 4. Программное обеспечение молекулярного моделирования биоструктур

Тема 5. Проведение НИР - Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы.

Тема 6. Аттестация

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При освоении дисциплины предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. В обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет. В курсе запланирована активная работа в компьютерном классе. Желательно также, чтобы студентам была предоставлена возможность удаленного доступа к ресурсам на вычислительном кластере.

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

Тема 1. Основы моделирования молекулярной динамики

Тема 2. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды

Тема 3. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами

Тема 4. Программное обеспечение молекулярного моделирования биоструктур

Тема 5. Проведение НИР - Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы.

Тема 6. Аттестация

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Примерный перечень вопросов проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

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. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные автокорреляционные функции. Коэффициенты переноса.
14. Методика проведения молекулярно-динамических расчетов с биомембранами.
15. Моделирование силового разворачивания белковой глобулы.

16. Постановка молекулярно-динамических расчетов с дендримерами

Вопросы и упражнения текущего контроля теоретической подготовки:

1. Какие представления лежат в основе моделирования тепловой подвижности атомарных систем методом молекулярной динамики? Когда и для каких молекулярных систем были проведены первые вычислительные эксперименты с применением метода молекулярной динамики?
2. Дайте схематическое описание постановки и проведения молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
3. Какие программные комплексы для моделирования молекулярной динамики биомолекулярных систем наиболее распространены в настоящее время?
4. 1 кг воды при нормальных условиях занимает объем 1 литр. Найдите объем, приходящийся в среднем на одну молекулу воды. Оцените расстояние между кислородами соседних молекул воды, предположив, к примеру, что молекулы воды расположены в узлах простой кубической решетки.
5. Приведите характерные величины пространственных, временных и энергетических масштабов, возникающих при описании молекулярных систем. Какие методы их оценки можете Вы предложить?
6. 1000 атомов заполняют куб и располагаются в узлах простой кубической решетки. Найдите число атомов (а) лежащих на поверхности куба и (б) лежащих в приповерхностном слое. Какую долю от всех атомов составляют атомы этих двух слоев?
7. Дать определение расчетной ячейки с периодическими граничными условиями. Аргументируйте полезность введения периодических граничных условий при моделировании конденсированного состояния вещества.
8. Пусть конденсированная молекулярная система имеет трансляционную симметрию по трем координатным направлениям с периодами a_x , a_y , a_z соответственно. Определим расчетную ячейку как прямоугольный параллелепипед, совпадающий с ячейкой периодичности и расположенный в начале координат. Для произвольной частицы, имеющей координаты (x, y, z) , выписать формулы (указать алгоритм) для нахождения координат ее образа в расчетной ячейке.
9. Полимерная молекула в разбавленном растворе имеет состояние клубка. Для моделирования ее поведения была предложена модель, в которой полимер был представлен цепочкой из 100 шаров диаметра 1, соединенных валентными связями длины 1, а растворитель - простыми шарами диаметра 1. Расчетная ячейка была взята в форме куба с периодическими граничными условиями. Оцените общее число шаров, которое необходимо поместить в расчетную ячейку для того, чтобы в процессе тепловых флуктуаций полимерного клубка сохранялись условия разбавленного раствора, то есть, чтобы полимер не имел контактов с образами полимера в соседних ячейках.
10. Взаимодействие атомов нейтральных газов хорошо описывает потенциал Леннард-Джонса. Приведите его вид. Укажите параметры потенциала и их физический смысл. Выведите формулы для сил межмолекулярного взаимодействия, задаваемых потенциалами Леннард-Джонса.
11. Сформулировать, в чем состоит алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация) для численного интегрирования классических уравнений Ньютона для системы взаимодействующих материальных частиц. С какой точностью на шаге находятся координаты атомов? Доказать! Как можно находить скорости частиц при использовании этого метода? Указать точность, с которой находятся при этом скорости.
12. Дать описание алгоритма с перескоками (или leap-frog алгоритма) для численного интегрирования классических уравнений движения взаимодействующих атомов. Вывести расчетные формулы. Привести оценки точности, с которой вычисляются координаты и скорости.
13. Привести формулы для скоростного алгоритма Верле для численного интегрирования классических уравнений движения молекулярной системы. Показать, что траектория, получаемая с применением этого метода, в точности совпадает с траекториями, которые дает применение простого алгоритма Верле и алгоритма с перескоками. В чем преимущество скоростного алгоритма Верле?

14. Описать возможные способы приведения моделируемой молекулярной системы к состоянию, отвечающему заданной температуре. Модификация уравнений движения для эффективного учета термостатирующего воздействия внешней среды.
15. Что такое "изотермическая молекулярная динамика"? Выписать уравнения движения, являющиеся аналогом уравнений Ньютона, но для которых интегралом уравнений движения является не полная энергия, а кинетическая энергия системы.
16. Дать описание "термостата Берендсена". Выписать уравнения движения для этого случая. Отметить известные недостатки применения этого метода для термостатирования молекулярной системы.
17. Привести уравнения движения молекулярной системы, использующие термостат Нозе-Гувера. Опишите, в чем состоит его применение.
18. Опишите постановку молекулярно-динамического вычислительного эксперимента по созданию цилиндрической полости, заданного радиуса, в фосфолипидном бислое.
19. Опишите постановку молекулярно-динамического вычислительного эксперимента по сжатию (сжатию) макромолекулы в цилиндрическую полость, заданного радиуса.
20. Опишите возможные этапы по приготовлению и проведению молекулярно-динамических вычислительных экспериментов гидратированного фосфолипидного бислоя с включением в него каналобразующего пептида грамицидина А.
21. Сконструируйте потенциальную функцию, описывающую взаимодействие атомов с непроницаемым сфероцилиндром. Как может выглядеть вычислительный эксперимент по выращиванию полости в форме сфероцилиндра в уже имеющейся модельной молекулярной системе?

7.1. Основная литература:

7.2. Дополнительная литература:

7.3. Интернет-ресурсы:

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

Освоение дисциплины "Компьютерные технологии и в биологии. Программирование и математическое моделирование" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020400.68 "Биология" и магистерской программе Информационные технологии в фармакологии .

Автор(ы):

Акберова Н.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

"__" _____ 201__ г.