

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

Введение в молекулярную динамику М2.В.3

Направление подготовки: 020400.68 - Биология

Профиль подготовки: Биоинформатика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Акберова Н.И.

Рецензент(ы):

Темников Д.А.

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

ознакомление с методами компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики молекул.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.В.3 Профессиональный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Введение в молекулярную динамику "опирается на знания , приобретенные при изучении биохимии, физики, аналитической химии, теории вероятностей и математической статистики, линейной алгебры и обеспечивает теоретическую подготовку и практические навыки в области структурной биоинформатики

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способен 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
ПК-10 (профессиональные компетенции)	глубоко понимает и творчески использует в научной и производственно-технологической деятельности знания фундаментальных и прикладных разделов специальных дисциплин магистерской программы
ПК-2 (профессиональные компетенции)	знает и использует основные теории, концепции и принципы в избранной области деятельности, способен к системному мышлению
ПК-3 (профессиональные компетенции)	самостоятельно анализирует имеющуюся информацию, выявляет фундаментальные проблемы, ставит задачу и выполняет полевые, лабораторные биологические исследования при решении конкретных задач по специализации с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, демонстрирует ответственность за качество работ и научную достоверность результатов

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

знания об основных методах компьютерного молекулярного моделирования конформационных свойств и динамики биологических молекул

2. должен уметь:

использовать поученные знания о данных методах в задачах структурной биоинформатики

3. должен владеть:

навыками работы со стандартными программами молекулярного моделирования, форматами данных, программами визуализации

применять методы молекулярного моделирования для решения конкретных научно-исследовательских задач

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен 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	1		2	0	0	устный опрос
2.	Тема 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.	1		2	4	0	устный опрос
3.	Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий.	1		2	6	0	контрольная работа
5.	Тема 5. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды	1		0	4	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов	1		0	8	0	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
7.	Тема 7. Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования	1		0	8	0	отчет
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	экзамен
	Итого			6	30	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Моделирование молекулярной динамики

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Введение. Моделирование молекулярной динамики. Предмет курса. Краткая история численного моделирования молекулярной динамики. Вычислительный эксперимент, его роль и место в нанобиотехнологии. Пространственные и временные масштабы. Единицы измерения в ?молекулярном мире?. Характерные единицы массы, энергии, времени. О числе частиц в моделируемой молекулярной системе. Эффективный учет растворителя. Периодические граничные условия.

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

лекционное занятие (2 часа(ов)):

практическое занятие (4 часа(ов)):

Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

практическое занятие (6 часа(ов)):

Тема 5. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды

практическое занятие (4 часа(ов)):

Тема 6. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов

практическое занятие (8 часа(ов)):

Тема 7. Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования

практическое занятие (8 часа(ов)):

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	1		подготовка к устному опросу	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия.	1		подготовка к устному опросу	4	устный опрос
3.	Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий.	1		подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
5.	Тема 5. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды	1		подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
6.	Тема 6. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов	1		подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
7.	Тема 7. Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования	1		подготовка к отчету	8	отчет
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При изучении дисциплины "Введение в молекулярную динамику" широко используются активные и интерактивные формы проведения занятий: компьютерные занятия и вычислительный эксперимент составляет более 60% всех аудиторных занятий

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

устный опрос , примерные вопросы:

Семинар по вопросам темы

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

устный опрос , примерные вопросы:

Семинар по вопросам темы

Тема 3. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий.

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа на компьютерах, отчет о результатах

Тема 5. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа на компьютерах, отчет о результатах

Тема 6. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа на компьютерах, отчет о результатах

Тема 7. Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования

отчет , примерные вопросы:

Отчет о результатах вычислительного эксперимента с визуализацией структуры молекулы

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

1. Методы компьютерного моделирования белков и нуклеиновых кислот. Методы молекулярной динамики.
- 2 Условия применимости классической динамики к задачам in vivo и in vitro.
- 3.Уравнения МД. Связь с термодинамикой. типы ансамблей.
4. Прямой расчет кулоновских сумм. Метод Эвальда. Быстрый мультипольный метод. Аппаратная реализация расчета электростатических потенциалов.
7. МД модели молекулы воды. Введение сольвента в пакете AMBER.
8. Кристаллографические данные о структуре белков. Ресурсы в Интернете. Формат PDB. Формат хуз, Z-матрица.
9. Структура пакета AMBER. Силовое поле Параметры методов.
10. Создание входных файлов NAMD.

7.1. Основная литература:

Аминова, Роза Мухаметовна. Эволюция теории химических сдвигов от молекулы в газовой фазе к сложным молекулярным системам / Р. М. Аминова, А. В. Аганов, Э. Р. Мартынчук // Ученые записки Казанского университета. ?Б.м...?2012. ?Т. 154, кн. 1, Сер. Физ.-мат. науки. ?С. 5-22.

Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье [и др.]; под ред. В. А. Палюлина и Е. В. Радченко; пер. с англ. А. А. Олиференко [и др.].?Москва: Бинوم. Лаборатория знаний, 2009. ?318 с.: ил., табл., цв. ил.; 25 см.?(Медицинская химия).?Загл. ориг.: Molecular Modeling / Hans-Dieter Holtje [et. al.].?Библиогр. в конце гл.

7.2. Дополнительная литература:

Крушельницкий, Алексей Германович. Молекулярная динамика белков и полипептидов. Исследование методом релаксационной и обменной ЯМР-спектроскопии: дис. на соиск. учен. степ. д.ф.-м.н.: спец. 01.04.07 / Крушельницкий Алексей Германович; Казан. ин-т биохимии и биофизики Казан. науч. центра Рос. акад. наук. ?Казань: Б.и., 2006. ?247 л.: ил.; 30. ?Библиогр.: л. 229-247 (268 назв.).

Рабинович А.Л. Молекулярная динамика бислоев ненасыщенных фосфатидилхолинов / А.Л. Рабинович, П.О. Рипатти, Н.К. Балабаев // Структура и динамика молекулярных систем: сборник статей. ?Казань..?2002. ?Вып.9. Т.2. ?С. 106-109

7.3. Интернет-ресурсы:

molecular visualization program VMD - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

GPU Acceleration of Molecular Modeling Applications - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/gpu/>

NAMD - Scalable Molecular Dynamics - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

NAMD User's Guide - MIT - http://web.mit.edu/vmd_v1.8.7/namd-ug.pdf

The Amber Molecular Dynamics Package - <http://ambermd.org/>

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

Освоение дисциплины "Введение в молекулярную динамику" 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 Биоинформатика .

Автор(ы):

Акберова Н.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Темников Д.А. _____

"__" _____ 201__ г.