

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
ФИЛИАЛ МГУ В Г. ДУБНЕ



УТВЕРЖДАЮ  
И.о. директора  
филиала МГУ в г.Дубне  
/ Э.Э. Боос /  
«14» 09 2022 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Наименование дисциплины:**

Математическое моделирование в биофизике

---

**Уровень высшего образования:**

Магистратура

---

**Направление подготовки:**

03.04.02 Физика

---

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Фундаментальная и прикладная ядерная физика

---

**Форма обучения:** Очная форма обучения

---

Дубна 2022 г.

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки программы магистратуры 03.04.02 «Физика».

Год (годы) приема на обучение \_\_\_\_\_

**Авторы–составители:**

1. доктор физ.-мат. наук, Холмуродов Холмирзо Тагойкулович, почасовик МГУ

**Руководитель магистерской программы:**

Доктор физ.-мат. наук, академик РАН Г.В. Трубников, по совместительству заведующий кафедрой физического факультета МГУ

## **Аннотация к рабочей программе дисциплины «Математическое моделирование в биофизике»**

Целью данного курса является формирование базовых знаний в области математического и молекулярного моделирования в биофизике. Рассматриваются уравнения движения, потенциалы и основные соотношения метода молекулярной динамики, применение метода молекулярной динамики для моделирования и изучения свойств системы Леннарда-Джонса, некоторые применения метода молекулярной динамики для моделирования молекулярных систем - от простых атомарных фрагментов до ионных структур, полимеров и биофизических макромолекул, описание гибридного подхода моделирования в методе молекулярной динамики (квантовые потенциалы и классические траектории).

### **Разделы рабочей программы**

1. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО).
2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (при наличии)
3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с формируемыми компетенциями
4. Формат обучения.
5. Язык обучения.
6. Содержание дисциплины.
7. Объем дисциплины
8. Структурированное по темам (разделам) содержание дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий
9. Текущий контроль и промежуточная аттестация.
10. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю).
11. Шкала оценивания.
12. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.
13. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.
14. Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

## 1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина «Математическое моделирование в биофизике» реализуется на 2-ом курсе в 3-ем семестре магистратуры и входит в состав профессионального блока вариативной части.

## 2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

Базовые знания в области общей и теоретической физики в объеме классических университетских курсов.

## 3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с формируемыми компетенциями

В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы:

<b>Код и наименование компетенции</b>	<b>Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции</b>	<b>Результаты обучения</b>
<b>МПК-2</b> Способен ставить, формализовать и решать задачи в области фундаментальной и прикладной ядерной физики	<b>ИМПК-2.3</b> Умеет анализировать литературные источники по теме фундаментальной и прикладной ядерной физики и нейтронографии	Знать: основные понятия и явления биофизики и их связь с фундаментальной и прикладной физикой. Уметь: находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике. Владеть: способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике.
<b>МПК-3</b> Способен самостоятельно (или) в составе научного коллектива применять математические методы для исследования физических явлений и процессов в области фундаментальной и прикладной ядерной физики при решении задач профессиональной деятельности.	<b>ИМПК-3.3</b> Способен использовать численные методы в модельных расчетах свойств атомных ядер и сечений ядерных реакций, при моделировании работы экспериментальных установок и анализе экспериментальных данных	Знать: численные методы, используемые в биофизике, и основные способы их реализации. Уметь: воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств. Владеть: навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения различных методов моделирования.

2. **Форма обучения:** очная.
3. **Язык обучения:** русский.
4. **Содержание дисциплины**

*Тема 1. Уравнения движения, потенциалы и основные соотношения метода молекулярной динамики (МД).*

Статус молекулярного моделирования в современной биофизики и биохимии. Уравнения движения и потенциалы силового поля. Термостаты и баростаты. Учет электростатики – центральная проблема в МД–моделировании.

*Тема 2. Подход МД моделирования по изучению свойств системы Леннарда-Джонса.*

Потенциал Леннарда-Джонса – наиболее употребляемый в изучении жидкостей. Компьютерный код для МД моделирования системы Леннарда-Джонса. Мониторинг равновесных распределений (состояний) в МД–моделировании. Динамические свойства: коэффициент диффузии.

*Тема 3. Некоторые применения МД моделирования молекулярных систем - от простых атомарных фрагментов до ионных структур, полимеров и биофизических макромолекул.*

Некоторые результаты вычисления кода МД для модели Леннарда-Джонса. МД–моделирование атомарных и ионных структур, полимеров и биологических макромолекул. Многоцелевые компьютерные коды МД–моделирования.

*Тема 4. Описание гибридного подхода в МД-моделировании (квантовые потенциалы и классические траектории).*

Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия нанокластеров золота с фрагментом ДНК в гексагональной геометрии. Молекулярно-динамическое моделирование фазовых превращений К–Na дисиликатного стекла в растворе активной среды. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия валиномицина с ионами  $K^+$  и  $Na^+$  в водной среде. Гибридные подходы классической молекулярной динамики (MD) и квантово-химической молекулярной динамики (qMD) (Ab initio quantum chemistry).

## 7. Объем дисциплины

НАЗВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ	Трудоемкость в зачетных единицах	объем учебной нагрузки в ак. часах					Самостоятельная работа студентов
		Общая трудоемкость	в том числе ауд. занятий			Учебно-практические занятия	
			Общая аудиторная нагрузка	Лекций	Семинаров		
Математическое моделирование в биофизике	2	72	36	18	18	36	

**8. Структурированное по темам (разделам) содержание дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий**

Изучение курса «Математическое моделирование в биофизике» включает в себя лекции, на которых рассматривается теоретическое содержание курса; семинарские занятия, предусматривающие углубленное изучение и обсуждение вопросов, обозначенных в темах дисциплины; самостоятельную работу, заключающуюся в подготовке к лекционным и семинарским занятиям. Темы, рассматриваемые на лекциях и изучаемые самостоятельно, закрепляются на семинарских занятиях, по вопросам, вызывающим затруднения, проводятся консультации.

№ тем ы		Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы					Са мо ст оя тель ная ра бо та	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
		Вс его ча со в	Л е к ц и и	С е м и на р ы	Учебно-практические занятия (лабораторные или практические занятия)			
1	Уравнения движения, потенциалы и основные соотношения метода молекулярной динамики (МД).	10	2	2		6	Оп	
2	Подход МД моделирования по изучению свойств системы Леннарда-Джонса	20	6	6		8	КР	
3	Некоторые применения МД моделирования молекулярных систем - от простых атомарных фрагментов до ионных структур, полимеров и биофизических макромолекул	18	5	5		8	КР	
4	Описание гибридного подхода в МД-моделировании (квантовые потенциалы и классические траектории).	18	5	5		8	Оп	
	Промежуточная аттестация	6				6	экзамен	
<b>ИТОГО:</b>		72	18	18		36		

ДЗ- домашнее задание, Оп- опрос, КР- контрольная работа, Т- тестирование

## 9. Текущий контроль и промежуточная аттестация.

Текущий контроль по дисциплине «Математическое моделирование в биофизике» осуществляется на лекциях и семинарских занятиях и заключается в оценке активности и качества участия в опросах и собеседованиях по проблемам, изучаемых в рамках тем лекционных занятий, аргументированности позиции; оценивается ширина используемых теоретических знаний.

Результаты сдачи экзамена оцениваются по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

## 10. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю).

Перечень оценочных средств, применяемых на каждом этапе проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине, представлены в таблице

Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде
<b>Оценочные средства текущего контроля</b>		
Тематический опрос (в форме ответов на вопросы)	Средство контроля, организованное как специальная беседа по тематике предыдущей лекции и рассчитанное на выяснение объема и качества знаний, усвоенных обучающимися по определенному разделу, теме, проблеме.	Перечень тем, изучаемых в рамках дисциплины
Собеседование (в форме беседы, дискуссии по теме)	Средство контроля, организованное как свободная беседа, дискуссия по тематике изучаемой дисциплины, рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по всем изученным разделам, темам; свободного использования терминологии для аргументированного выражения собственной позиции.	Перечень тем, изучаемых в рамках дисциплины
Тестирование	Средство контроля, позволяющее получить оценку уровня фактических знаний аспиранта по изученной теме.	Образцы тестов
<b>Оценочные средства промежуточной аттестации</b>		
Письменная работа	Средство, позволяющее оценить сформированность систематических представлений о методах научно-исследовательской деятельности.	Перечень вопросов к экзамену
Собеседование	Средство, позволяющее получить экспертную оценку знаний, умений и навыков по для оценивания и анализа различных фактов и явлений в своей профессиональной области.	Требования к порядку проведения собеседования

## 11. Шкала оценивания.

Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения			
	2/ не зачтено	3/ зачтено	4/ зачтено	5/ зачтено
ЗНАТЬ: основные понятия и явления биофизики и их связь с фундаментальной и прикладной физикой. ИМПК-2.3 З-1	Отсутствие знаний основных понятий и явлений биофизики и их связи с фундаментальной и прикладной физикой.	В целом успешные, но не систематически знания основных понятий и явлений биофизики и их связи с фундаментальной и прикладной физикой.	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы знания основных понятий и явлений биофизики и их связи с фундаментальной и прикладной физикой.	Успешные и систематические знания основных понятий и явлений биофизики и их связи с фундаментальной и прикладной физикой.
ЗНАТЬ: численные методы, используемые в биофизике, и основные способы их реализации. ИМПК-3.3 З-1	Отсутствие знаний численных методов, используемых в биофизике, и основных способов их реализации.	В целом успешные, но не систематически знания численных методов, используемых в биофизике, и основных способов их реализации.	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы знания численных методов, используемых в биофизике, и основных способов их реализации.	Успешные и систематические знания численных методов, используемых в биофизике, и основных способов их реализации.
УМЕТЬ: находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике. ИМПК-2.3 У-1	Отсутствие умения находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике.	В целом успешное, но не систематическое умение находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике.	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы умение находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике.	Успешное и систематическое умение находить и анализировать литературные и иные источники информации и базы данных по биофизике.



		биофизике.	информации и базы данных по биофизике.	
УМЕТЬ: воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств. ИМПК-3.3 У-1	Отсутствие умения воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств.	В целом успешное, но не систематическое умение воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств.	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы умение воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств.	Успешное и систематическое умение воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств.
ВЛАДЕТЬ: способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике. ИМПК-2.3 В-1	Отсутствие/фрагментарное владение способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике.	В целом успешное, но не систематическое владение способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике.	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы владение способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике.	Успешное и систематическое владение способностью оценивать различные модели и приближения на применимость, точность и адекватность их применения в биофизике.
ВЛАДЕТЬ: навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения различных методов моделирования ИМПК-3.3 В-1	Отсутствие/фрагментарное владение навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения различных методов	В целом успешное, но не систематическое владение навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы владение навыками использования математики и программирования, достаточными	Успешное и систематическое владение навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения различных методов

	моделирования.	различных методов моделирования	для успешного применения различных методов моделирования	моделирования.
--	----------------	---------------------------------	--	----------------

## 12. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

*Материалы текущего контроля успеваемости обучающихся*

*Задачи можно найти по адресу:*

**Пример:**

Вопросы по теории:

1. Основные уравнения и потенциалы метода МД.
2. Что такое силовое поле в МД моделировании?
3. Основные понятия ОС Линукс.
4. Команды в CONTROL, CONFIG, FIELD.

Задачи:

1. Что такое точность результатов анализа?
2. Какова формула RMSD?
3. Дисперсия выборки.
4. Применение метода отжига (simulated annealing).
5. Относительное стандартное отклонение.
6. Команды пакета VMD для визуализации данных.
7. Функция радиального распределения

## 13. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Экзамен проводится в форме письменной работы с последующим устным собеседованием.

*Материалы промежуточной аттестации обучающихся*

Вопросы к экзамену:

1. Основные понятия МД анализа.
2. Диффузионные параметры.
3. Потенциал Леннарда-Джонса.
4. Оценка химических связей молекул.
5. Статистика МД результатов и методы оценки.
6. Методы расчета кулоновских сил и потенциалов.
7. Структурные параметры и функции.
8. Метод среднеквадратичных отклонений.
9. Классификация силовых полей.
10. Расчеты динамических уравнений.
11. Визуализация химических структур.

#### 14. Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

##### Основная литература

1. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов / Н.Ф. Степанов – М.: Изд. МГУ, 2001.
2. Сид Дж.В., Этвуд Дж.Л. Супрамолекулярная химия. В 2-х томах. Том 1. М., Академкнига, 2007.
3. Филлиппович Ю.Б. Основы биохимии. М., Высшая школа, 1985.
4. Рубин А.Б. Биофизика. М.: Высш. шк., 1987.

##### Дополнительная литература

1. Албертс Б., Брэй Д., Льюис Дж. и др. Молекулярная биология клетки. В 3-х томах. Том 1. М., Мир, 1994.
2. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц, т.1 Механика, М. Наука - 1973
3. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц, т.2 Теория поля, М. Наука - 1973
4. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц, т.8 Электродинамика сплошных сред, М. Наука - 1982
5. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц, т.3 Квантовая механика, М. Наука - 1974
6. И.Е. Иродов, Волновые процессы, М. ЛБЗ ЮНИМЕДИАСТАЙЛ - 2002
7. Дж. Тейлор, Теория рассеяния, М. Мир - 1975
8. Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский, Квантовая теория углового момента, Ленинград Наука - 1975
9. Мембраны: Ионные каналы: Сб. ст. М.: Мир, 1981.
10. Молекулярное моделирование: теория и практика / Хельтзе Х.-Д., Зиппль В., Ронянь Д., Фолькерс Г. БИНОМ, 2010, ISBN 978-5-9963-0156-0.
11. Haile J.M. MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION. Elementary Methods. A Wiley-Interscience Publication JOHN WILEY & SONS, INC. 1997.
12. Doyle D.A., Cabral J.M, Pfuetzner R.A. et al. The structure of the potassium channel: Molecular basis of K<sup>+</sup> conduction and selectivity // Science. 1998. Vol.280. P.69.
13. J.A. Adam, Physics Reports, 2002, v.356, pp. 229-365

При реализации дисциплины может быть использовано следующее программное обеспечение:

1. Операционная система Astra Linux ( <https://astralinux.ru/> ) или аналог, с офисным пакетом.
2. AMBER ([ambermd.org](http://ambermd.org)): Программный комплекс Amber (Assisted Model Building with Energy Refinement) состоит из набора силовых полей для моделирования макромолекулярных структур (белки, нуклеиновые кислоты и ряд других классов молекул) и пакета программ квантовой и молекулярной механики. Пакет находится в открытом доступе.
3. CHARMM ([www.charmm.org](http://www.charmm.org)): Пакет программ CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular mechanics) для молекулярного моделирования широкого круга систем - от небольших молекул до биологических макромолекул, с применением различных энергетических функций и моделей — от квантовых моделей и силовых полей в молекулярной механике до полноатомных классических потенциалов. Пакет находится в открытом доступе.
4. DL\_POLY ([www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL\\_POLY/](http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/)): Пакет для моделирования молекулярной динамики сложных систем с проведением как последовательных, так и параллельных расчетов. Доступны версии: DL\_POLY\_2, DL\_POLY\_3 и DL\_POLY\_4.

Возможны параллельные расчеты с числом атомов до 1 млн с использованием 1024 процессоров. Адаптирован под графические игровые процессоры, GPU (Graphical Processing Units), с использованием языка CUDA. Имеется в свободном доступе для исследовательских и образовательных целей.

Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. <http://www.edu.ru> – портал Министерства образования и науки РФ
2. <http://www.ict.edu.ru> – система федеральных образовательных порталов «ИКТ в образовании»
3. <http://www.openet.ru> - Российский портал открытого образования
4. <http://www.mon.gov.ru> - Министерство образования и науки Российской Федерации
5. <http://www.fasi.gov.ru> - Федеральное агентство по науке и инновациям

#### **Материально-техническое обеспечение**

В соответствии с требованиями п. 5.3. образовательного стандарта МГУ по направлению подготовки «Физика», курс может быть прочитан в поточной аудитории при наличии: работающих электрических розеток, компьютера, проектора, экрана, учебной доски.