

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 /
«01» сентября 2024 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

Математическое моделирование в биофизике

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

03.04.02 Физика

Направленность (профиль)/специализация образовательной программы:

Физика элементарных частиц

Форма обучения:

Очная

Дубна 2024

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению 03.04.02 «Физика», утвержденным приказом МГУ от 30.12.2020 г. № 1366.

Год (годы) приема на обучение _____

Авторы–составители:

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

Руководитель магистерской программы:

Доктор физ.-мат. наук, профессор академик РАН В.А. Матвеев, заведующий кафедрой физического факультета МГУ

Аннотация к рабочей программе дисциплины

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).

Дисциплина реализуется на 2 курсе в 3 семестре и входит в состав вариативной части.

Объем дисциплины составляет 2 з.е., в том числе 36 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 36 академических часа, отведенных на самостоятельную работу обучающихся.

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю) – экзамен в 3 семестре.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

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

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

Курсы математического анализа, разделы теоретической механика, электродинамика и квантовая механика из курса теоретической физики.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения
ОПК-4	<p><u>Знать</u> типовые процедуры применения проблемно-ориентированных прикладных программных средств в области современной физики конденсированного состояния</p> <p><u>Уметь</u> использовать современные информационные и компьютерные технологии, средства коммуникаций, способствующие повышению эффективности научной деятельности в области современной физики конденсированного состояния</p> <p><u>Владеть</u> методами научного моделирования при решении поставленных исследовательских задач с использованием современных информационных технологий</p>
МПК-3	<p><u>Знать</u> численные методы, используемые в биофизике, и основные способы их реализации.</p> <p><u>Уметь</u> воплощать численные методы решения задач и описания явлений с помощью языков программирования и иных средств.</p> <p><u>Владеть</u> навыками использования математики и программирования, достаточными для успешного применения различных методов моделирования.</p>

4. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе: 36 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 36 академических часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

№ темы		Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы					Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
		Всего часов	Лекции	Семинары	Учебно-практические занятия (лабораторные или практические занятия)	Самостоятельная работа	
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
ИТОГО:		72	18	18		36	

6. Фонд оценочных средств для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

6.1. Типовые задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения:

Вопросы по теории:

1. Основные уравнения и потенциалы метода МД.
2. Что такое силовое поле в МД моделировании?
3. Основные понятия ОС Линокс.
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

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.

6.2. Шкала и критерии оценивания

Результат освоения дисциплины	Критерии оценивания знаний, умений и навыков			
	2/ не зачтено	3/ зачтено	4/ зачтено	5/ зачтено
Знания	Отсутствие знаний	В целом успешные, но не систематические знания	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы знания	Успешные и систематические знания
Умения	Отсутствие умения применять фундаментальных и актуальных проблем.	В целом успешное, но не систематическое умение применять знания	В целом успешно, но содержащее отдельные пробелы умение применять знания	Успешное и систематическое умение применять знания
Навыки	Отсутствие/фрагментарные навыки в решении задач	В целом успешные, но не систематические навыки в решении задач	В целом успешные, но содержащее отдельные пробелы навыки в решении задач	Успешные и систематические навыки в решении задач

7. Ресурсное обеспечение

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 / Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян 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, Pfuetszner R.A. et al. The structure of the potassium channel: Molecular basis of K⁺ 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. Программный продукт Java 8 (64-bit) Oracle Corporation
2. Программный продукт Dev-C++ Bloodshed Software
3. Операционная система Microsoft Windows 10 Education академическая лицензия
Программный продукт Microsoft Project Professional 2013 академическая лицензия
4. Программный продукт Microsoft Visio Professional 2013 академическая лицензия
5. Программный продукт Microsoft Visual Studio Professional 2013 - RUS [Русский(Россия)] академическая лицензия
6. AMBER (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.
7. CHARMM (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.

8. DL_POLY (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 обычной аудитории при наличии: работающих электрических розеток, компьютера, проектора, экрана, учебной доски.

8. Язык преподавания: русский