



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор Інституту теоретичної
фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України

А. Г. Загородній

«5» 02 2020 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

БК 6. Методи молекулярної динаміки в біофізиці 1 для аспірантів

Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	104 Фізика та астрономія
Освітній рівень	доктор філософії
Освітньо-наукова програма	Теоретична фізика
Вид дисципліни	вибіркова
Форма навчання	денна
Навчальний рік	2020/2021
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: Перепелиця Сергій Миколайович

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2020

Розробник: Перепелиця Сергій Миколайович, канд. фіз.-мат. наук, (старший дослідник, вчений секретар)

ЗАТВЕРДЖЕНО



Директором Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук

(Handwritten signature)

(Загороднім А.Г.)
(прізвище та ініціали)

Протокол засідання Вченої ради № 1 від
« 5 » 02 2020 р.

Схвалено Науково - методичною комісією Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України.

Протокол від « 5 » 02 2020 року № 1

Голова науково-методичної комісії
Лев)

(Handwritten signature)

(підпис)

(чл.-кор. НАН України Б.І.

(прізвище та ініціали)

« 5 » 02 2020 року

1. Навчальна дисципліна «Методи молекулярної динаміки в біофізиці 1» є складовою освітньо-професійної програми підготовки фахівців за освітньо-кваліфікаційним рівнем «**доктор філософії**» галузі знань «природничі науки», спеціальності фізика та астрономія (104) Дана дисципліна є нормативною за спеціальністю «фізика та астрономія».

Викладається у 1 семестрі в обсязі 90 год. (3 кредити ECTS), зокрема: лекції - 32 год., лабораторні роботи - 0 год., самостійна робота - 51 год. У курсі передбачено 2 змістових модулів і 2 модульні контрольні роботи. Завершується дисципліна заліком.

Мета дисципліни: надати базові знання про методи комп'ютерної симуляції біологічних макромолекул.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи статистичної фізики.
2. Знати основи класичної механіки.
3. Знати основи квантової механіки.
4. Знати основи фізики біологічних макромолекул.
5. Мати елементарні навички роботи з комп'ютерними програмами.

3. Анотація навчальної дисципліни: Курс лекцій присвячено методам молекулярної динаміки, які застосовуються до вивчення біофізичних об'єктів (ДНК, РНК, білки). В рамках курсу буде зроблено огляд основ методу. Будуть описані основні принципи роботи з пакетами програм, які застосовуються в моделюванні молекул. На прикладі програми VMD буде надано можливість побудувати системи біологічних молекул для подальшого моделювання в рамках пакету NAMD. Для засвоєння матеріалу студентам будуть запропоновані різні практичні завдання, що полягають в запуску симуляції, обробці та аналізі результатів моделювання. За результатами даного курсу аспірант буде вміти створити атомну модель структури молекул, запустити симуляцію системи і обробити одержані дані.

4. Завдання (навчальні цілі):

1. Опанувати основи методу класичної молекулярної динаміки.
2. Опанувати основи роботи з пакетами програм VMD та NAMD.
3. Опанувати основи роботи на кластері Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)
Код	Результат навчання		
1.1	1. <i>Знати:</i> Основи методів молекулярної динаміки на різних рівнях організації біологічних молекул (електронному, атомному та мезоскопічному).	<i>Лекції</i>	<i>Усні відповіді, домашня робота</i>
1.2	1. <i>Знати:</i> Користуватися комп'ютерними програмами, які застосовуються для моделювання методом молекулярної динаміки на різних рівнях.	<i>Лекції</i>	<i>Усні відповіді, домашня робота</i>
2.1	1. <i>Вміти:</i> Користуватися програмами NAMD та VMD для молекулярної	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольна робота</i>

	динаміки, які є у вільному доступі.		
2.2	Вміти: Користуватися комп'ютерною програмою VMD.	Практичні заняття	Контрольна робота

6. Схема формування оцінки.

6.1 Форми оцінювання студентів:

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

У змістовий модуль 1 (ЗМ1) входять теми 1, 2, у змістовий модуль 2 (ЗМ2) - теми 3, 4. Обов'язковим для допуску до екзамену є отримання мінімальної кількості балів з кожного колоквіуму та з контрольної роботи ($0,6 \cdot R$, де R – відповідна шкала вимірювання).

	ЗМ1		ЗМ2	
	Min.	Max.	Min.	Max.
Колоквіум 1	12	20	—	—
Колоквіум 2	—	—	12	20

Студентам, які набрали сумарно меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум у 12 балів за кожну модульну контрольну роботу, для одержання екзамену обов'язково необхідно перескласти відповідну модульну контрольну з належним рівнем знань.

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до «Положення про рейтинг студентів, організацію та проведення поточного і семестрового контролю результатів навчання».

При простому розрахунку отримаємо:

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Екзамен	Підсумкова оцінка
Мінімум	12	12	36	60
Максимум	20	20	60	100

При цьому кількість балів:

- 1–34 відповідає оцінці «незадовільно» з обов'язковим повторним вивченням дисципліни;
- 35–59 відповідає оцінці «незадовільно» з можливістю повторного складання;
- 60–64 відповідає оцінці «задовільно» («достатньо»);
- 65–74 відповідає оцінці «задовільно»;
- 75–84 відповідає оцінці «добре»;
- 85–89 відповідає оцінці «добре» («дуже добре»);
- 90–100 відповідає оцінці «відмінно».

6.2 Організація оцінювання:

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою, яка складається із 3 змістових модулів. Система оцінювання знань включає поточний, модульний та семестровий контроль знань. Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100-бальною шкалою. Форми поточного контролю: оцінювання виконання домашніх робіт, усних відповідей та контрольних робіт, виконаних студентами під час практичних занять.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90–100
Добре / Good	75–89
Задовільно / Satisfactory	60–74
Незадовільно / Fail	0–59
Зараховано / Passed	60–100
Не зараховано / Fail	0–59

7. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних та практичних занять

Загальний обсяг **90 год.**, в тому числі:

Лекцій — **32 год.**

Консультації — **4 год.**

Залік — **1 год.**

Самостійної роботи (позааудиторної) — **51 год.**

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари	С/Р	Інші форми контр.
Змістовий модуль 1 Основи методу молекулярної динаміки					
1	Тема 1. Ідея методу молекулярної динаміки. Алгоритми інтегрування рівнянь руху.	8	0	12	
2	Тема 2. Потенціали для описання взаємодії між атомами в молекулах та міжмолекулярної взаємодії. Застосування різних термостатів. Обмеження та проблеми методу молекулярної динаміки.	8	0	15	
<i>Колоквіум 1</i>					1
Змістовий модуль 2 Класична молекулярна динаміка					
3	Тема 3. Основні положення методу класичної молекулярної динаміки (CMD). Силкові поля в CMD. Побудова топології молекул в методі класичної CMD. Програмні пакети реалізації CMD. Програми VMD і NAMD.	8	0	12	
4	Тема 4. Алгоритми побудови модельної системи молекул (індивідуальні завдання для кожного студента). Протоколи симуляції. Вибір оптимальних параметрів симуляції. Симуляція молекулярних систем на обчислювальному кластері Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. Методи обробки і аналізу одержаних траєкторій моделювання.	8	0	12	
<i>Колоквіум 2</i>					1
<i>Екзамен</i>					1
ВСЬОГО		32	0	51	3

8. Рекомендовані джерела:

1. Schlick T., Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide. New York: Springer-Verlag, Inc. – 2002. – 634 p.
2. Tutorial and user guide VMD. <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/>
3. Tutorial and user guide NAMD. <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/>

З усіма питаннями можна звертатись до викладача на електронну пошту perepelytsya@bitp.kiev.ua