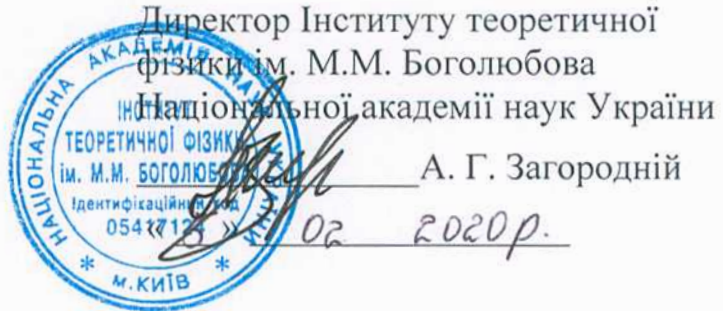


«ЗАТВЕРДЖУЮ»



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

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

БК 7. Методи молекулярної динаміки в біофізиці 2 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	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	екзамен

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)
(підпис)

(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 2» 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 модулі і 2 модульні контрольні роботи. Завершується дисципліна **екзаменом**.

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. Знати основи методу класичної молекулярної динаміки.
6. Мати елементарні навички роботи з комп'ютерними програмами.
7. Мати елементарні навички роботи з комп'ютерними програмами VMD та NAMD.
8. Мати елементарні навички роботи на комп'ютерному кластері.

3. Анотація навчальної дисципліни: Курс лекцій присвячено конкретним застосуванням методу молекулярної динаміки в молекулярній біофізиці. В рамках курсу буде зроблено огляд різновидів молекулярної динаміки, які набули свого розвитку за останнє десятиліття, а саме методів квантової та крупнозернистої молекулярної динаміки. Будуть описані основні принципи цих методів і на конкретних прикладах буде розглянуто як створюються системи для моделювання і як запускаються симуляції на обчислювальному кластері. За основу для практичного виконання симуляцій буде взято програми VMD та NAMD, ознайомлення з якими відбулося в минулому семестрі. Для засвоєння матеріалу аспірантам будуть запропоновані різні практичні завдання, що полягають в запуску симуляції, обробці та аналізі результатів моделювання. За результатами даного курсу аспірант буде вміти створити вихідну систему структури молекул, запустити симуляцію і обробити одержані дані.

4. Завдання (навчальні цілі):

1. Опанувати основи методу квантової та крупнозернистої молекулярної динаміки.
2. Опанувати основи роботи з пакетами програм VMD та NAMD для побудови систем, що моделюються методами квантової та крупнозернистої молекулярної динаміки.
3. Вміти запустити симуляцію 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 крупнозернистої і квантової молекулярної динаміки.	<i>Лекції</i>	<i>Усні відповіді, домашня робота</i>
1.2	1. <i>Знати:</i> Користуватися комп'ютерними програмами для симуляції крупнозернистих моделей молекулярних систем.	<i>Лекції</i>	<i>Усні відповіді, домашня робота</i>
2.1	1. <i>Вміти:</i> Користуватися програмами NAMD та VMD для молекулярної динаміки для запуску симуляцій в рамках	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольна робота</i>

	методів квантової та крупнозернистої молекулярної динаміки.		
2.2	Вміти: Користуватися комп'ютерною програмою VMD та NAMD для крупнозернистих моделей молекул.	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 колоквиуму та з контрольної роботи ($0,6 \cdot R$, де R – відповідна шкала вимірювання).

	ЗМ1		ЗМ2	
	Min.	Max.	Min.	Max.
Колоквиум 1	12	20	—	—
Колоквиум 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 отримуємо:

	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 2 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.**

Екзамен — **1 год.**

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

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари	С/Р	Інші форми контр.
Змістовий модуль 1 Крупнозерниста молекулярна динаміка					
1	Тема 1. Основні положення методу крупнозернистої молекулярної динаміки (CGMD). Філософії побудови силового поля: з гори вниз та з низу в гору. Зворотній бальцманівський метод визначення потенціалів взаємодії (Inverse Boltzmann method). Метод оберненого Монте Карло визначення потенціалів взаємодії (Inverse Monte Carlo method).	8	0	12	
2	Тема 2. Програмні пакети реалізації крупнозернистого МД. Програма MagiC. Побудова крупнозернистої моделі біологічних 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	15	
<i>Колоквіум 1</i>					1
Змістовий модуль 2 Квантова молекулярна динаміка					
3	Тема 3. Основні положення методу квантової молекулярної динаміки (QMD). Квантова молекулярна динаміка в наближенні Борна-Опенгеймера. Квантова молекулярна динаміка в наближенні Кар-Паріселло.	8	0	12	
4	Тема 4. Програмні пакети QMD. Програмний пакет cp2k. 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:

- Schlick T., Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide. New York: Springer-Verlag, Inc. – 2002. – 634 p.
- Atkins P., Friedman R. Molecular quantum mechanics, fourth edition. Oxford University Press (2005).
- Tutorial and user guide VMD. <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/>
- Tutorial and user guide NAMD. <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/>
- Tutorial and user guide MagiC. <http://www.fos.su.se/~sasha/magic/>
- Tutorial and user guide cp2k. <https://www.cp2k.org/doku.php?id=tutorials&do=>

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