

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики НАН України



ЗАТВЕРДЖУЮ

Директором Інституту фізики НАН
України, член-кор. НАНУ, д.ф.-м.н.

М.В. Бондар

(підпис)

«25» серпня 2021 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ДВА.12

Молекулярне моделювання у біофізиці

для аспірантів

спеціальності: 104 Фізика і астрономія

третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти – доктор філософії

Київ - 2021

Розробник:

доктор. фіз.-мат. наук, провідний науковий співробітник відділу фізики біологічних систем Інституту фізики НАНУ . Єсєєв /С.О. Єсєєвський/

Робочу програму узгоджено науково-методичною радою

Протокол № 1 від 30.09. 2021 р.

Головою науково-методичної ради Бондар /М.В. Бондар/

Робочу програму затверджено Вченою радою Інституті фізики НАНУ

Протокол № 10 від 21.10. 2021 р.

Голова Вченої ради Бондар /М.В. Бондар/

Робочу програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» 21.10. 2021 р.

Гарант освітньої програми Бондар /М.В. Бондар/

Пролонговано Вченою радою Інституту фізики НАН України:

навчальні роки пролонгації	Голова Вченої ради ІФ НАН України	підпис	№ протоколу	дата протоколу
20 <u>22</u> /20 <u>23</u>	<u>Бондар М.В</u>	<u>Бондар</u>	<u>15</u>	<u>25.08.2022р.</u>
20____/20____				
20____/20____				
20____/20____				

1. Загальні відомості

Найменування показників	Характеристика дисципліни за денною формою навчання
Вид дисципліни	вибіркова
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Загальний обсяг кредитів / годин	4/120
Курс	2
Семестр	2
Кількість змістових модулів з розподілом	1
Обсяг кредитів	4
Обсяг годин, В тому числі:	120
Лекції	30
Практичні заняття	15
Самостійна робота	75
Форма підсумкового контролю	екзамен

2. Мета, завдання та очікувані результати навчальної дисципліни

Робоча програма навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» є нормативним документом, який розроблений на основі освітньо-наукової програми, далі ОП, (затверджена Вченою радою Інституту фізики НАН України, протоколом № від 20 року) підготовки здобувача третього рівня відповідно до навчального плану спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Передумова вивчення. Навчальний курс ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» є складовою циклу професійної підготовки фахівців третього освітньо-кваліфікаційного рівня “доктор філософії”. Програма курсу орієнтована на аспірантів, які самостійно або під керівництвом наукового керівника планують та здійснюють наукові дослідження відповідно до планів навчання у аспірантурі. Курс розроблений з орієнтацією як на аспірантів, які спеціалізуються у області фізики м’якої речовини, біофізики, так і на слухачів, які спеціалізуються у інших напрямках фізики та астрономії.

Мета навчальної дисципліни. ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»: є формування у майбутніх науковців теоретичних знань, практичних умінь та навиків з принципів, методів та можливостей молекулярного моделювання, що дозволять їм застосовувати цей метод у своїй науковій роботі.

1. Зміст навчальної дисципліни. Теоретичні та практичні знання, набуті при вивченні дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» дають поглиблене ознайомлення з розділами фізики м’якої речовини та біофізики, що дозволяє навчити аспірантів працювати за використання методів молекулярного моделювання, інтерпретувати отримані результати, використовувати отримані результати у їх науковій роботі.

Предметом навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» є гіпотези, теоретичні моделі та експериментальні результати у галузі біофізики, тощо.

Основними завданнями навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» є ознайомити аспірантів з сучасними методами молекулярного моделювання та їх практичним застосуванням; зформувані фізичне мислення у аспірантів в межах матеріалу, що вивчається. Дисципліна готує аспірантів до сприймання матеріалу спецкурсів, передбачених програмою спеціалізації.

Фахові програмні результати навчання (вимоги до знань та вмінь)

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен

Знати:

основні поняття курсу, викладені у програмі; розуміти принципи молекулярного моделювання, їх можливості, область практичних застосувань.

Уміти:

застосувати набуті знання на практиці

Завданням навчальної дисципліни (відповідно до переліку ОП) ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці» набути компетентності:

Загальні: ЗК1,ЗК2, ЗК3, ЗК4, ЗК5, ЗК6, ЗК7, ЗК8.

Фахові: ФК1, ФК2, ФК3, ФК9

Програмні результати навчання ПРН2, ПРН3, ПРН4, ПРН5, ПРН6, ПРН7, ПРН8, ПРН9, ПРН10, ПРН11, ПРН12, ПРН13, ПРН14.

3. Тематичний план

(структура залікового кредиту)

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

(2 курс – 2 семестр)

№	Зміст	Лекції, год.	Практичні, год.	Самостійна робота, год.	Разом, год.
1.	Лекція 1. Вступ. Основні етапи розвитку молекулярного моделювання. Основні принципи та поняття методу.	3	0	7	10
2.	Лекції 2. Типи та різновиди молекулярного моделювання, їх просторово-часові обмеження та області застосування до різних об'єктів.	3	3	7	13
3.	Лекція 3. Специфіка біологічних систем як фізичних об'єктів, ієрархія часів у біологічних системах.	3	0	8	11
4.	Лекції 4. Основні принципи та поняття класичної молекулярної динаміки. Поняття інтегратора, термостату, баростату, періодичних граничних умов.	3	0	7	10
5.	Лекції 5 Принципи створення та врівноваження модельних систем у випадку основних типів біологічних макромолекул.	3	3	7	13
6.	Лекції 6. Аналіз траєкторій молекулярної динаміки та їх візуалізація. Програмні пакети для молекулярної графіки та рендерінгу.	3	3	8	14
7.	Лекція 7. Методи прискореного семплінгу та обмеження конфігураційного простору: констрейнти, рестрейнти, колективні координати.	3	3	8	14
8.	Лекція 8. Принципи параметризації та побудови силових полів для молекулярної динаміки.	3	0	8	11
9.	Лекція 9. Молекулярний докінг — основні принципи та різновиди.	3	3	8	14
10.	Лекції 10. Методи ієрархічного та гібридного моделювання: QM/MM, грубозернисті моделі, мультискейлінг.	3	0	7	10
Всього		30	15	75	120

Методичне забезпечення навчальної дисципліни забезпечують:

опорні конспекти лекцій, бібліотечні посібники зі списку рекомендованої літератури, електронні посібники, мультимедійні презентації, діючі нормативно-правові законодавчі акти України, довідково-інформаційні інтернет-джерела тощо.

4. Зміст навчальної дисципліни

ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

- **Тема 1.** Вступ. Основні етапи розвитку молекулярного моделювання. Основні принципи та поняття методу.
Література: 1-6
- **Тема 2.** Типи та різновиди молекулярного моделювання, їх просторово-часові обмеження та області застосування до різних об'єктів.
Література: 1-6
- **Тема 3.** Специфіка біологічних систем як фізичних об'єктів, ієрархія часів у біологічних системах.
Література: 1-6
- **Тема 4.** Основні принципи та поняття класичної молекулярної динаміки. Поняття інтегратора, термостату, баростату, періодичних граничних умов.
Література: 1-6
- **Тема 5.** Принципи створення та врівноваження модельних систем у випадку основних типів біологічних макромолекул.
Література: 1-6
- **Тема 6.** Аналіз траєкторій молекулярної динаміки та їх візуалізація. Програмні пакети для молекулярної графіки та рендерінгу.
Література: 1-6
- **Тема 7.** Методи прискореного семплінгу та обмеження конфігураційного простору: констрейнти, рестрейнти, колективні координати.
Література: 1-6
- **Тема 8.** Принципи параметризації та побудови силових полів для молекулярної динаміки.
Література: 1-6
- **Тема 9.** Молекулярний докінг — основні принципи та різновиди.
Література: 1-6
- **Тема 10.** Методи ієрархічного та гібридного моделювання: QM/MM, грубозернисті моделі, мультискейлінг.
Література: 1-6

5. Практичні заняття

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

Практичне закріплення лекційного матеріалу та наукові доповіді аспіранта пов'язані з темами лекцій.

6. Самостійна робота

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

№	Зміст самостійної роботи аспірантів	Обсяг, годин
1.	Вивчення матеріалу лекції	30
2.	Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення	45
Усього за навчальну дисципліну		75

7. Методи викладання

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

У процесі викладання дисципліни використовуються такі методи:

- 1) методи організації та здійснення навчально-пізнавальної діяльності (бесіда, лекція; ілюстрація; лабораторні роботи, реферати; самостійна робота студентів);
- 2) методи стимулювання й мотивації навчально-пізнавальної діяльності (навчальні дискусії, модульно-рейтингова система знань);
- 3) методи контролю (самоконтролю, взаємоконтролю), корекції (самокорекції, взаємокорекції) за ефективністю навчально-пізнавальної діяльності.

8. Рейтингова система оцінювання

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

Основними формами організації контролю у процесі вивчення студентами даної дисципліни є індивідуальна, групова та фронтальна перевірка знань, вмінь та навичок студентів (усна та письмова). Рейтинг аспіранта складається з наступних отриманих балів:

1. Експрес-контроль – 20 балів.
2. Індивідуальні заняття та самостійна робота – 40 балів.
3. Екзамен – 40 балів.

Шкала відповідності оцінок

Рейтингова оцінка	Значення оцінки	Рейтинг у відсотках, %
A	Відмінно – відмінний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з, можливими незнаесними недоліками.	90-100
B	Дуже добре – достатньо високий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу без суттєвих (грубих) помилок.	82-89
C	Добре – добрий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з незначною кількістю помилок.	75-81
D	Задовільно – посередній рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу із значною кількістю недоліків, достатній для подальшого навчання або ж професійної діяльності.	69-74
E	Достатньо - мінімально можливий допустимий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу.	60-100
FX	Незадовільно з можливістю повторного складання – незадовільний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з можливістю повторного перескладання після самостійного доопрацювання.	35-59
F	Незадовільно з з обов'язковим повторним вивченням курсу – низький рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу, що вимагає повторного вивчення матеріалів курсу.	1-34

9. Орієнтовний перелік екзаменаційних питань з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

1. Коли і як з'явилося молекулярне моделювання?
2. Які існують різновиди молекулярного моделювання? Які у них часові та просторові обмеження?
3. В чому специфіка біологічних систем як фізичних об'єктів?
4. Яка принципова схема класичної молекулярної динаміки?
5. Які квантові ефекти не враховуються у класичній молекулярній динаміці?
6. Що таке інтегратор?
7. Що таке термостат і які вони бувають?
8. Що таке баростат і які вони бувають?
9. Як враховуються граничні умови і які обмеження це накладає?
10. Як контролюється врівноважування різних біологічних об'єктів?
11. Якими інструментами проводиться аналіз траєкторій МД?
12. Якими інструментами проводиться візуалізація траєкторій МД?
13. Що таке констрейнти та рестрейнти, яка між ними різниця?
14. Для чого нужни колективні координати при семплінгу і які вони бувають?
15. Як проводиться параметризація силових полів?
16. Що таке молекулярний докінг?
17. Які існують різновиди молекулярного докінгу?
18. Що таке методи QM/MM і коли вони застосовуються?
19. Що таке грубозернисті моделі і коли вони застосовуються?
20. Що таке методи мультискейлінгу і коли вони застосовуються?

10.Рекомендована література:

з навчальної дисципліни ДВА.12 «Молекулярне моделювання у біофізиці»

1. Simulating the Physical World, Herman J. C. Berendsen, Cambridge University Press, 2012.
2. <https://cmcd.hms.harvard.edu/activities/bcmp201/class>
3. <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/> по туторіалам на сайті
4. <https://www.gromacs.org>
5. <http://www.mdtutorials.com/gmx/>
6. http://web.mst.edu/~vojtat/class_5403/MolecularDynamics.pdf