

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Інститут високих технологій**

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник директора

з науково-педагогічної роботи

Галина ГРАБЧУК

« 03 » 2021 року

*протокол 29*

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Техніки і застосування молекулярної динаміки**

*(повна назва дисципліни)*

**для студентів**

галузь знань	09 Біологія	<i>(шифр і назва)</i>
спеціальність	<b>091 Біологія</b>	<i>(шифр і назва спеціальності)</i>
освітній рівень	<b>магістр</b>	<i>(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)</i>
освітня програма	<b>Біоінформатика та структурна біологія</b>	<i>(назва освітньої програми)</i>
вид дисципліни	<b><u>вибіркова</u></b>	

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	<b>3</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>4.0</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: Нипорко Олексій Юрійович, д.б.н., завідувач кафедри молекулярної біології та біоінформатики

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*

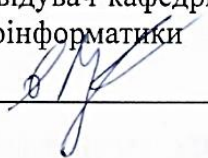
**КИЇВ – 2021**

Розробники:

Нипорко Олексій Юрійович, д.б.н., завідувач кафедри молекулярної біології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

  
\_\_\_\_\_ Олексій НИПОРКО


Протокол № 4 від «05» лютого 2021р.

Схвалено науково - методичною комісією

«Інституту високих технологій»

Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «05» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_  (Русінчук Н.М.)

«05» 03 2021 року

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – детальне ознайомлення студентів з фундаментальними основами розрахунків поведінки біомолекулярних комплексів та оволодіння ними сучасними методами молекулярної динаміки для розрахунків структурних, термодинамічних і кінетичних параметрів біомолекулярних систем та змін цих параметрів протягом тривалих інтервалів часу.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

1. Опанувати навчальні дисципліни «Теоретична і прикладна біоінформатика», «Структурна та функціональна геноміка».
2. Володіти елементарними навичками комп'ютерного пошуку інформації та користування інтернет-ресурсами.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

*Предметом навчальної дисципліни є методи молекулярної динаміки, що використовуються для реконструкції поведінки біомолекулярних систем та структурних особливостей перебігу внутрішньоклітинних процесів.*

*В курсі здійснюється огляд основних сучасних принципів обчислення молекулярної динаміки як за допомогою підходів класичної, так і квантової механіки, а також застосування комбінованих схем розрахунку. Значна увага приділяється «теорії в практиці», тобто переважна більшість вивчаємих підходів розглядається через конкретні приклади їх реалізації у відповідному програмному забезпеченні. Студенти мають змогу також опанувати ряд методів точної оцінки термодинамічних показників біомолекулярних систем, зокрема, визначення характеру змін вільної енергії в процесах біомолекулярного розпізнавання і взаємодії, що є критичним у передбаченні перебігу цих процесів.*

**4. Завдання (навчальні цілі):**

*Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:*

*ЗК2. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).*

*СК1. Здатність до поглиблення теоретичних та методологічних знань у галузі біологічних наук і на межі предметних галузей.*

*СК2. Здатність застосовувати знання у професійній діяльності з урахуванням новітніх досягнень, у т.ч. для дослідницької роботи.*

*СК3. Здатність використовувати знання й практичні навички в галузі біологічних наук та на межі предметних галузей для виконання професійних завдань, у т.ч. для дослідження різних рівнів організації живих організмів, біологічних явищ і процесів*

*СК4. Навички аргументованого ведення дискусії та спілкування в галузі біологічних наук і на межі предметних галузей.*

*СК11. Вміння формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.*

**5. Результати навчання за дисципліною:**

<b>Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)</b>		<b>Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання</b>	<b>Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)</b>	<b>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</b>
<b>Код</b>	<b>Результат навчання</b>			
1.1	<i>Знати теоретичні основи реалістичного опису динаміки біомолекулярних комплексів за допомогою обчислювальних підходів</i>	<i>Лекції</i>	<i>Іспит: 1 запитання</i>	8%
1.2	<i>Знати області застосування тих чи інших методичних підходів до розрахунків молекулярної динаміки.</i>	<i>Лекції, практичні роботи</i>	<i>Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента</i>	16%
2.1	<i>Вміти проводити підготовку біомолекулярних систем до розрахунків молекулярної динаміки, генерувати координатні та топологічні файли.</i>	<i>Лекції, практичні роботи</i>	<i>Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента</i>	24%
2.2	<i>Уміти конвертувати між собою дані розрахунків молекулярної динаміки, отримані за допомогою різних пакетів програмного забезпечення, та візуалізувати молекулярно-динамічні траєкторії.</i>	<i>Практичні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента</i>	16%
2.3	<i>Уміти розраховувати структурні, термодинамічні і кінетичні показники досліджуваних біомолекулярних систем.</i>	<i>Практичні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента</i>	16%
3.1	<i>Вміти донести інформацію про постановку задачі та розв'язання її методами молекулярної динаміки до цільової аудиторії.</i>	<i>Самостійна робота студента</i>	<i>Доповідь під час інтерактивних лекцій</i>	6%
4.1	<i>Вміти планувати розрахунковий експеримент та обриту правильний метод/групу методів розрахунку молекулярної динаміки залежно від його цілей і завдань.</i>	<i>Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента</i>	<i>Доповідь під час інтерактивних лекцій, семестрова робота студента</i>	14%

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

<b>Результати навчання дисципліни</b>	<b>1.1</b>	<b>1.2</b>	<b>2.1</b>	<b>2.2</b>	<b>2.3</b>	<b>3.1</b>	<b>4.1</b>
<b>Програмні результати навчання</b>							
ПРН2. Використовувати бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації.		+	+	+	+		+
ПРН4. Представляти результати наукової роботи письмово (у вигляді звіту, наукових публікацій тощо) та усно (у формі доповідей та захисту звіту) з використанням сучасних технологій, коректно вести дискусію.	+	+	+	+	+		+
ПРН6. Знати основні правила біологічної етики, біобезпеки, біозахисту, основні підходи до оцінки ризиків за умов застосування новітніх біологічних, біотехнологічних і медико-біологічних методів та технологій.	+	+	+		+		
ПРН11. Вміти проводити статистичну обробку, аналіз та узагальнення отриманих експериментальних даних із використанням програмних засобів та сучасних інформаційних технологій, що використовують в галузі біології.							+
ПРН12. Знати і аналізувати принципи структурно-функціональної організації, механізмів регуляції та адаптації організмів.					+		+
ПРН16. Застосовувати педагогічні технології на рівні достатньому для реалізації розроблених програм навчальних дисциплін за спеціалізацією у вищих навчальних закладах.						+	

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання:

1. Самостійна семестрова робота: РН 2.1. - 48 балів/32 бали.

2. Доповідь під час лекції: РН 1.4,3.1 - 12 балів/6 балів.

- підсумкове оцінювання: іспит – 40 балів.

Усього: 100 балів/60 балів.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Іспит	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

### 7.2 Організація оцінювання:

На початку семестру студенти отримують теми для підготовки коротких (3-5 хвилин) доповідей під час проведення лекцій. Починаючи з 2 лекційного заняття студенти роблять свої доповіді із використанням будь-яких методів та форм представлення інформації: зміст доповіді оцінюється з точки зору її новизни, актуальності, науковості (використання наукових джерел інформації) та повноти викладення у 7 балів, а якість донесення інформації до аудиторії – у 5 балів. Мінімум за дане завдання – 6 балів – може бути отримано за умови підготовки доповіді у текстовому форматі з презентацією без усної доповіді під час лекції.

Після першого практичного заняття студенти отримують індивідуальні завдання до семестрової роботи. Кожне завдання складається з 6 частин. Кожна окрема частина присвячена темі окремого практичного заняття з першого по шосте. Кожна частина оцінюється в 8 балів: 5 бали за правильність розв'язку та 3 бали за обґрунтування методів розв'язку, викладене у звіті. У випадку помилок у розв'язку завдання студенту дозволяється їх виправити після перевірки. Мінімальну кількість балів студент може отримати у випадку правильного розв'язання усіх завдань без представлення їх письмового обґрунтування.

У кінці семестру після завершення вивчення тем проводиться іспит. Іспит спрямований на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр та вміння застосовувати отримані знання до розв'язання задач. Результати іспиту студенти дізнаються у той самий день. Іспит вважається складеним, якщо студент надав хоча короткі відповіді на 60 % запитань. У цьому випадку він отримує мінімально можливу оцінку за іспит – 24 бали.

Вважається курс пройденим лише за умови успішного виконання кожного з трьох оцінювань хоча б на мінімально можливий бал: підготовку доповіді, розв'язання семестрової роботи та складання іспиту.

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійна робота
<b>Частина I Теоретичне навчання</b>				
1	<b>Тема 1.</b> Динаміка атомів та молекул. Способи комп'ютерного відтворення динаміки. Наближення Борна-Опенгеймера. Класична і квантова динаміка в описі поведінки біомолекул.	2		5
2	<b>Тема 2.</b> Рівняння руху в класичній молекулярній механіці. Інтегрування рівнянь руху. Основні алгоритми інтегрування.	2		5
3	<b>Тема 3.</b> Потенціали взаємодії. Силкові поля, що застосовуються в розрахунках молекулярної динаміки, їх особливості. Параметризація силових полів. Топологія системи та її окремих компонентів.	2	2	6
4	<b>Тема 4.</b> Розрахунки електростатичних взаємодій в біомолекулярних системах. Метод Евальда з використанням мережі частинок. Квантові та топологічні методи розрахунку зарядів на атомах.	2	1	6
5	<b>Тема 5.</b> Біомолекула в реалістичних умовах. Підготовка системи до розрахунку МД. Методи моделювання розчинника. Явний та неявний розчинник. Періодичні граничні умови. Статистичні ансамблі.	2		6
6	<b>Тема 6.</b> Біомолекула в реалістичних умовах (II). Підтримка температури і тиску в системі. Основні термостати і баростати.	2	1	6
7	<b>Тема 7.</b> Особливості розрахунків молекулярної динаміки «великих» систем. Біомолекулярні комплекси в клітинному середовищі як приклади таких систем. Застосування паралельних обчислень, алгоритми та програмні засоби розпаралелювання.	2		6
9	<b>Тема 8.</b> Енергії, сили, швидкості. Розрахунок термодинамічних параметрів на основі даних молекулярної динаміки.	2	1	6
10	<b>Тема 9.</b> Особливості розрахунків молекулярної динаміки біологічних мембран.	2		6
11	<b>Тема 10.</b> Методи оцінки зміни вільної енергії в біомолекулярних комплексах. Зонтична вибірка, метадинаміка. Пертурбація вільної енергії, термодинамічне інтегрування.	2	2	6
12	<b>Тема 11.</b> Стохастична та ленжевенівська динаміка.	2		6
8	<b>Тема 12.</b> Квантова молекулярна динаміка. Методи BOMD, ADMP, CPMD.	2		6
13	<b>Тема 13.</b> Комбінована молекулярна динаміка. QM/MM. ONIOM.	2	1	6
14	<b>Тема 14.</b> Неквантове моделювання хімічних реакцій в біомолекулярних системах. Силове поле ReaxFF та його програмні реалізації. Прямий кінетичний експеримент.	2	2	6
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>28</b>	<b>10</b>	<b>82</b>

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – 28 год.

Практичні заняття - 10 год.

Самостійна робота - 82 год.

## 9. Рекомендовані джерела:

### *Основна:*

1. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, 2004/
2. Li, Xinzhen; Wang, En-Ge Computer simulations of molecules and condensed matter from electronic structures to molecular dynamics, World Scientific Publishing Company, 2018
3. **Marx D, Hutter J** Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods. Cambridge University Press, 2009.

### *Додаткова:*

1. **Sharma S.** Molecular dynamics simulation of nanocomposites using BIOVIA Materials Studio, Lammmps and Gromacs. Elsevier, 2019
2. **Zhang J.** Molecular Dynamics Analyses of Prion Protein Structures. Springer Singapore, 2018.

## 10. Додаткові ресурси:

1. <https://ambermd.org/>
2. <https://charmm-gui.org/>
3. <https://www.charmm.org/>
4. <https://www.gromacs.org/>
5. <https://www.cpmc.org/wordpress/>
6. <http://gaussian.com/>
7. <https://www.lammps.org/>
8. <http://www.mdtutorials.com/>
9. <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>