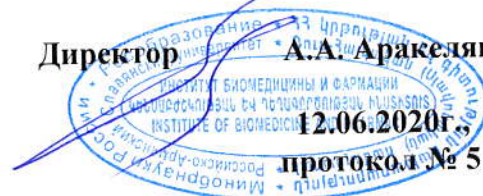


ГОУ ВПО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ

Составлен в соответствии с государственными требованиями к минимуму содержания и уровню подготовки выпускников по указанным направлениям и Положением «Об УМКД РАУ».

УТВЕРЖДАЮ:

Директор **А.А. Аракелян**



Институт: Биомедицины и фармации

Кафедра: Биоинженерии, биоинформатики и молекулярной биологии

Для специальности: Биоинженерия и биоинформатика

Автор: к.б.н. Аракелов Г. Г.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

Дисциплина: Молекулярное моделирование

Специальность: «Биоинженерия и биоинформатика»

ЕРЕВАН

1. Аннотация

Молекулярное моделирование представляет собой набор *in silico* методов для моделирования взаимодействия между структурами молекул и физико-химическими свойствами, которые зависят или влияют на данные взаимодействия. В данной дисциплине рассматриваются предмет, задачи и практическое применение молекулярного моделирования динамики биологических молекул. Дисциплина основана на практических и теоретических аспектах молекулярного моделирования, что дает возможность студентам использовать приобретенные навыки в собственных экспериментах. Курс рассчитан на формирование у студентов четвертого курса необходимых теоретических и практических знаний, которые необходимы для их дальнейшего становления специалистами в области биоинженерии и биоинформатики.

2. Требования к исходным уровням знаний и умений студентов

Для изучения данной дисциплины необходимы знания в области: структурной аннотация биополимеров; молекулярной биологии; биофизики; химии и физики белков и нуклеиновых кислот; биохимии; органической и физической химии; математической статистики; теории вероятности; информатики.

3. Цель и задачи дисциплины

Основная цель предмета - получение студентами знаний и навыков о современных методах, возможностях и прикладных программных пакетах молекулярного моделирования биологических систем.

4. Требования к уровню освоения содержания дисциплины

После прохождения дисциплины студент должен:

знать

- основные методы, понятия, подходы и определения, используемые в молекулярном моделировании динамики биологических молекул с использованием силовых полей;
- основные методы и подходы моделирования молекулярной динамики;
- возможности молекулярной динамики и технические ограничения;

уметь

- излагать основные теоретические аспекты методов молекулярной динамики;
- проводить расчеты с использованием прикладных программных пакетов молекулярной динамики;
- анализировать результаты расчетов молекулярной динамики;

владеть

- практическими способами и инструментами молекулярной динамики;
- навыками работы с прикладными программными пакетами AMBER, pDMD, Gromacs, VMD.

5. Объем дисциплины и виды учебной работы по рабочему учебному плану

Виды учебной работы	Всего часов	Количество часов по семестрам							
		<u>8</u> сем.	сем.	сем.	сем.	сем.	сем.	сем.	сем.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1. Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	108	108							
1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	64	64							
1.1.1. Лекции	32	32							

1.1.2. Практические занятия тренингового типа, в т. ч.									
1.1.2.1. Обсуждение прикладных проектов (с защитой тезисов)									
1.1.2.2. Кейсы (анализ практич. ситуаций)									
1.1.2.3. Деловые игры, тренинги (а также ролевые игры, имитация ситуаций)									
1.1.3. Семинары (а также групповые обсуждения)									
1.1.4. Лабораторные работы (практич. эксперименты, демонстрац. опыты)	32	32							
1.1.5. Другие виды аудиторных занятий: Моделирование игрового взаимодействия (компьютерный тренажер)									
1.2. Самостоятельная работа	17	17							
2. Консультации									
3. Письменные домашние задания									
4. Контрольные работы									
5. Курсовые работы									
6. Эссе и рефераты									
7. Расчетно-графические работы									
8. Другие методы и формы занятий **									
9. Форма текущего контроля: Устный опрос на семинаре и тестирование умений									
10. Форма промежуточного контроля: 3 письменных контрольных по темам									
11. Форма итогового контроля: Экзамен	27 Экзамен	27 Экзамен							

6. Методика формирования итоговой оценки

Распределение весов по формам контроля и оценки академической успеваемости

	Вес формы текущего контроля в результирующей оценке текущего контроля	Вес формы промежуточного контроля в итоговой оценке	Вес итоговых оценок промежуточных контролей в результирующей	Вес оценки посещаемости, результирующей оценки
--	---	---	--	--

Вид учебной работы/контроля	промежуточного контроля			оценке промежуточного контроля			промежут. контролей и оценки итог. контроля в результирующей оценке итогового контроля
	M1	M2	M3	M1	M2	M3	
Контрольная работа				0	0	1	
Тест							
Курсовая работа							
Лабораторные работы							
Письменные домашние задания							
Эссе (реферативного типа)							
Устный опрос (семинарс.)	0	0	0				
Реферат							
Вес результирующей оценки текущего контроля в итоговых оценках промежут. контролей				0	0	0	
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежут. контролей							0
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежут. контролей							0
Вес итоговой оценки 3-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежут. контролей т.д.							1
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результир. оценке итогов. контроля							0,4
Экзамен/зачет (оценка итогового контроля)							0,6
	$\sum = 1$	$\sum = 1$	$\sum = 1$	$\sum = 1$	$\sum = 1$	$\sum = 1$	$\sum = 1$

7. Содержание дисциплины:

7.1. Тематический план (Разделы дисциплины и виды занятий) по учебному плану:

Разделы и темы дисциплины	Всего часов	Лекции, часов	Практ. занятия, часов	Семинары, часов	Лабор., часов	Другие виды занятий, часов
1	3=4+5+6+7+8	4	5	6	7	8
Введение.	2	2				
Раздел 1. Молекулярная динамика.						
Тема 1.1. Основы молекулярной динамики.	2	2				
Тема 1.2. Силовые поля.	2	2				

Тема 1.3. Минимизация потенциальной энергии.	2	2				
Раздел 2. Классическая молекулярная динамика.						
Тема 2.1. Программные пакеты Amber и Gromacs.	10	4			6	
Тема 2.2. Форматы файлов молекулярной динамики.	4	2			2	
Тема 2.3 Алгоритм молекулярной динамики.	18	8			10	
Раздел 3. Дискретная молекулярная динамика.						
Тема 3.1. Программный пакет rDMD.	8	4			4	
Раздел 4 Анализ результатов молекулярной динамики.						
Тема 4.1. Анализ уравновешенного состояния системы.	4	2			2	
Тема 4.2. Анализ траекторий.	6	2			4	
Тема 4.3. Энергия взаимодействия.	6	2			4	
ИТОГО	64	32			32	

7.2. Содержание разделов и тем дисциплины:

Введение.

Этапы развития молекулярного моделирования. Основные понятия молекулярного моделирования. Области применения молекулярного моделирования. Компьютерное оборудование и прикладные программные пакеты. Литература по молекулярному моделированию.

Раздел 1. Молекулярная динамика.

Тема 1.1. Основы молекулярной динамики. История, развитие и основы молекулярной динамики. Приложения молекулярной динамики.

Тема 1.2. Силовые поля. Основные представления о силовых полях. Типы атомов, связей, углов и взаимодействий. Функциональный вид взаимодействий. Модели молекулы воды. Силовые поля Amber, Gromacs и Medusa.

Тема 1.3. Минимизация потенциальной энергии. Понятие о поверхности потенциальной энергии. Минимум, переходное состояние и интермедиат. Глобальная и локальная минимизация геометрии. Алгоритмы локальной минимизации. Алгоритмы глобальной минимизации геометрии. Метод скорейшего спуска. Метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона-Рафсона.

Раздел 2. Классическая молекулярная динамика.

Тема 2.1. Программные пакеты Amber и Gromacs. Основы работы с Amber и Gromacs. Основной информационный поток в Amber и Gromacs.

Тема 2.2. Форматы файлов молекулярной динамики. Файлы молекулярной топологии. Файлы структур молекул. Файл параметров молекулярной динамики. Файлы индексирования. Энергетические файлы. Файлы траекторий.

Тема 2.3 Алгоритм молекулярной динамики. Подготовка системы. Сольватация и нейтрализация системы. Минимизация энергии. Уравновешивание системы. NVT и NPT ансамбли уравновешивания. Инициализация и перезапуск молекулярной динамики. Молекулярная динамика на CPU и GPU.

Раздел 3. Дискретная молекулярная динамика.

Тема 3.1. Программный пакет pDMD. Основы работы с pDMD. Основной информационный поток в pDMD. Файлы параметров и состояний. Инициализация и перезапуск дискретной молекулярной динамики.

Раздел 4 Анализ результатов молекулярной динамики.

Тема 4.1. Анализ уравновешенного состояния системы. Колебания энергии, температуры, давления и плотности системы на протяжении молекулярной динамики.

Тема 4.2. Анализ траекторий. RMSD. RMSF. Радиус гирации. Анализ водородных связей. Кластерный анализ.

Тема 4.3. Энергия взаимодействия. MMPBSA. MMGBSA. Вклад аминокислот в энергию взаимодействия

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Рекомендуемая литература:

а) Базовый учебник (учебно-практические пособия)

1. Хельтье, Х. Д. "Молекулярное моделирование: теория и практика: пер. с англ.–2-е изд." М.: Бинوم. Лаборатория знаний (2013).
2. Poghosyan A.A. Shahinyan A.A. "Computational biology and bioinformatics. Molecular Dynamics and modeling", Nairi 2011, Yerevan, Armenia, pp. 208, ISBN 978-5-550-01639-8.
3. Leach, Andrew R. Molecular modelling: principles and applications. Pearson education, 2001.
4. Dokholyan, Nikolay V., ed. Computational modeling of biological systems: from molecules to pathways. Springer Science & Business Media, 2012.

б) Дополнительная литература

1. Schlick, Tamar. Molecular modeling and simulation: an interdisciplinary guide: an interdisciplinary guide. Vol. 21. Springer Science & Business Media, 2010.
2. Jensen, Jan H. *Molecular modeling basics*. CRC Press, 2010.

8.2. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс биоинформатики Института молекулярной биологии НАН РА.
Серверы Лаборатории компьютерного моделирования биологических процессов Института молекулярной биологии НАН РА.