

УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

« Моделирование биологических систем на GPU »

Лекции: 24 часа

Практические занятия: 24 часа

Самостоятельная работа: 24 часа

Всего часов: 72

Лекторы: к. ф.-м. н. В.А. Барсегов, к. ф.-м. н. А.А. Жмуров,
Ассистенты: А.М. Казеннов, А.Е. Алексеенко.

1. Биологические системы и их свойства

Белки, белок - белковые комплексы и агрегаты, ДНК, РНК, комплексы ДНК и РНК с белками. Биологические функции белков, белок - белковых комплексов и агрегатов. Биологические свойства молекул ДНК и РНК.

2. Фундаментальные биологические процессы.

Фолдинг белка, механическая и термическая денатурация белка, формирование и распад белок - белковых комплексов и агрегатов. Примеры.

3. Методы численного моделирования биологических систем.

Молекулярная динамика в полноатомном разрешении в явном и неявном растворителе, динамика Ланжевена. Молекулярное силовое поле, аппроксимации.

4. Реализации численных методов молекулярного моделирования

Уравнения Ньютона и Ланжевена. Генераторы случайных чисел на центральном процессоре (ЦП) и графическом сопроцессоре (ГП). Численное интегрирование уравнений движения на ЦП и ГП. Ковалентные взаимодействия: реализации расчёта сил на ЦП и на ГП. Невалентные взаимодействия: задача N тел. Методы оптимизации алгоритмов на ГП. Подход «парализация по частицам», использование разделяемой памяти для ускорения вычислений. Списки соседей (Верле). Потенциалы с переключением. Граничные условия. Потенциал вибрации углов между ковалентными связями. Реализация алгоритмов на ГП. Подход «парализации по взаимодействующим тройкам частиц».

5. Структура программных реализаций молекулярной динамики.

Использование программных пакетов для молекулярной динамики. Подготовка системы, минимизация энергии, нагрев и равновесные симуляции. Типы файлов, используемых в молекулярной динамике. Файлы координат, топологии, бинарные файлы координат. Базы данных белковых структур (pdb.org), использование программы VMD.

6. Эксперимент, моделирование и теория

Эксперименты на единичных молекулах АСМ и их моделирование. Сложность в сопоставлении данных экспериментов с результатами моделирования. Упрощённые модели. Процесс Орнштейна-Уленбека. Расчёт температуры через распределение Максвелла-Больцмана. Расчёт давления и объёма системы. Модель цепи Рауса. Модели воды.

7. Продвинутое методы молекулярной динамики

Методы молекулярной динамики, используемые для разрешения конфигурационного пространства: метод обмена репликами (REMD) и метод зонтичного сканирования конфигурационного пространства. Методы Монте-Карло.

Литература

1. D. Frankel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications*. Academic Press, 1996.
2. T. E. Creighton. *Proteins: Structures and Molecular Properties*. W.H. Freeman, and Co., 1992.
3. D. van der Spoel et. al., *GROMACS User Manual*, 4.5 ed., 2009.
4. Боресков А.В., Харламов А.В. *Основы работы с технологией CUDA*. – Изд-во: ДМК Пресс, 2010.
5. D. B. Kirk, W.-M. W. Hwu, ed., *Programming Massively Parallel Processors: A Hands-on Approach*. Morgan Kaufmann, 2010.
6. H. Nguyen, ed., *GPU Gems 3*. Addison-Wesley, 2008.
7. W.-M. W. Hwu, ed. *GPU Computing Gems*. Morgan Kaufmann, 2011.
8. NVIDIA, *NVIDIA CUDA Programming Guide*, 4.0 ed., 2011.
9. NVIDIA, *NVIDIA CUDA C Programming Best Practices Guide*, 4.0 ed., 2011.
10. A. Zhmurov, R. I. Dima, Y. Kholodov, V. Barsegov, “SOP-GPU: Accelerating biomolecular simulations in the centisecond timescale using graphics processors,” *Proteins* (2010) **78**: 2984–2999.
11. А. А. Жмуров, В. А. Барсегов, С. В. Трифионов, Я. А. Холодов и А. С. Холодов, “Моделирование микромеханики биомолекул на графических процессорах с использованием динамики Ланжевена,” *Мат. Модел.* (2011) **23**: 133–156.
12. A. Zhmurov, K. Rybnikov, Y. Kholodov, and V. Barsegov, “Generation of random numbers on graphics processors: Forced indentation in silico of the bacteriophage HK97,” *J. Phys. Chem. B*, (2011) **115**: 5278–5288.