

## Молекулярное моделирование биополимеров

К.ф.-м.н. Грудинин Сергей Владимирович, Казеннов Андрей Максимович, Буслаев Павел Ильич.

Цель курса – обеспечить понимание основных принципов молекулярного моделирования биологических систем с использованием нескольких уровней детализации, а также используемых вычислительных методов и их реализаций как на центральном, так и на графическом процессоре.

Содержание курса:

1. Введение в курс. Молекула воды.

Содержание курса. Строение молекулы воды и её свойства. Водородные связи.

2. Белки, ДНК, РНК

Аминокислоты и их свойства. Пептидная связь. Первичная структура белков.

Дисульфидные связи. Вторичная структура белков: альфа-спирали и бета-листы.

Третичная структура, классификация структур белков, примеры. ДНК и РНК. Азотистые основания, двойная спираль.

3. Программа VMD

Основы использования программы. Поиск структур в базе данных белковых структур.

Примеры репрезентаций белков. Файл PDB. Первое задание.

4. Молекулярная механика

Описание биомолекулярной системы при помощи законов физики. Потенциальная функция силового поля: уравнения и параметры. Уравнения движения. Периодические граничные условия.

5. Использование пакета NAMD

Конфигурационные файлы. Этапы моделирования: минимизация, нагрев, эквilibрация. Запуск симуляций для простейшей системы. Визуализация и анализ результатов. Второе задание.

6. Ограничения молекулярного моделирования

Ограничения молекулярного моделирования. Сложность в сопоставлении результатов моделирования и экспериментальных результатов. Использование крупнозернистых моделей. Использование аппаратного ускорения.

7. Графические процессоры

Архитектура графических процессоров. Особенности аппаратной части. Программная модель CUDA. Глобальная, разделяемая память, регистры. Вычислительные ядра. Копирование данных между центральным и графическим процессорами. Пример программной реализации на ГП.

8. Строение биологических мембран

Составляющие биологических мембран. Строение и функции липидов. Моделирование липидных бислоёв. Холестерин, его структура и функции. Мембранные белки: их структура, функции и значение. Моделирование динамики мембранных белков в липидном окружении.

Рекомендованная литература:

1. Жмуров А.А., Барсегов В.А. Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров – Москва 2013 (доступно в электронном виде на сайте [hpc.mipt.ru](http://hpc.mipt.ru)).
2. T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation*. Springer, first ed., 2002.
3. D.C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, second ed., 2004.
4. А. В. Боресков и А. А. Харламов, *Основы работы с технологией CUDA*. ДМК Пресс, 2012.
5. А. Боресков, Н. Марковский, и А. Харламов, *Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA*. Издательство МГУ, 2012.
6. D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, C. Kutzner, A. R. van Buuren, E. Apol, P. J. Meulenhoff, D. P. Tieleman, A. L. T. M. Sijbers, K. A. Feenstra, R. van Drunen, and H. J. C. Berendsen, *GROMACS User Manual*. The GROMACS development team, 4.0 ed., 2009.
7. Nelson, D. L., Lehninger, A. L., & Cox, M. M. *Principles of biochemistry*
8. Weng J, Wang W., Molecular dynamics simulation of membrane proteins, Adv Exp Med Biol. 2014
9. W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, “VMD: Visual molecular dynamics,” *J. Molec. Graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33–38, 1996.
10. A. D. MacKerell, “Empirical force fields for biological macromolecules: Overview and issues,” *J. Comput. Chem.*, vol. 25, no. 13, pp. 1584–1604, 2004.

Интернет-ресурсы:

<http://www.hpc.mipt.ru>  
<http://www.pdb.org>  
<http://www.ks.uius.edu/Research/vmd/>  
<http://www.ks.uius.edu/Research/namd/>  
<http://www.gromacs.org>