
УТВЕРЖДЕНА

Решением Ученого совета
АНО ВО «Центральный университет»
«25» мая 2026 г.
Протокол № 2

**Рабочая программа дисциплины (модуля)
«Молекулярное моделирование»**

Направление подготовки: 02.04.01 Математика и компьютерные науки

Направленность (профиль) подготовки: III в биотехе

Специализация: Структурная биоинформатика

Квалификация (степень) выпускника: магистр

Форма обучения: очная

Срок освоения программы: 2 года

Год набора: 2026

**Москва
2026**

Содержание

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)	3
2. Перечень планируемых результатов обучения.....	5
3. Тематический план.....	8
4. Содержание дисциплины (модуля).....	8
5. Учебно-методическое обеспечение	9
6. Материально-техническое обеспечение	9
7. Методические и оценочные материалы	11

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)

Рабочая программа дисциплины (модуля) «Молекулярное моделирование» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – магистратура по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе, утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 810 от 23.08.2017 года.

Изучение дисциплины (модуля) «Молекулярное моделирование» обеспечивает подготовку специалистов, способных работать в междисциплинарных областях – от биотехнологии до наноматериалов – с использованием высокопроизводительных вычислений и современных аналитических методов.

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Настоящая дисциплина (модуль) включена в учебный план по программе подготовки магистратуры по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе и входит в обязательную часть Блока 1 как дисциплина по выбору, подлежащая обязательному изучению на специализации «Структурная биоинформатика».

Дисциплина (модуль) изучается на 2 курсе в 3 семестре.

Цель изучения дисциплины (модуля): формирование у обучающихся теоретических знаний и практических навыков в области молекулярного моделирования, необходимых для проведения вычислительных экспериментов, анализа динамики биомолекул и интерпретации результатов в контексте физико-химических и биологических процессов.

Задачи изучения дисциплины (модуля):

- изучить физико-химические основы межмолекулярных взаимодействий и принципы построения силовых полей, используемых в молекулярной динамике;
- освоить этапы подготовки и проведения вычислительного эксперимента: от построения системы до анализа траекторий;
- научиться выбирать адекватные методы и программные пакеты (GROMACS, AMBER, VMD и др.) в зависимости от типа задачи;
- овладеть навыками анализа и визуализации молекулярных систем с использованием специализированных инструментов и скриптов;
- развить способность интерпретировать результаты моделирования и критически оценивать их достоверность в научных и прикладных исследованиях.

В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен:

знать:

- основные принципы и методы молекулярного моделирования;
- физико-химические основы межмолекулярных взаимодействий и потенциалов силовых полей (Lennard-Jones, кулоновские, валентные, угловые и др.);
- структуру и параметризацию силовых полей (AMBER, CHARMM, OPLS, GROMOS и др.);
- этапы проведения вычислительного эксперимента: построение системы, минимизация энергии, термостатирование, equilibration, производство данных;
- принципы визуализации и анализа молекулярных систем (RMSD, RMSF, радиус инерции, водородные связи, свободная энергия и др.);

- ограничения и достоверность различных методов моделирования;
- основы статистической термодинамики, необходимые для интерпретации результатов моделирования;
- применение молекулярного моделирования в биохимии, фармакологии, материаловедении и нанотехнологиях.

уметь:

- подготавливать молекулярные структуры для моделирования (очистка PDB-файлов, добавление атомов, задание зарядов, сольватация);
- выбирать подходящий метод моделирования в зависимости от поставленной задачи;
- настроить и запустить расчеты молекулярной динамики с использованием программных пакетов (например, GROMACS, AMBER, NAMD, LAMMPS);
- анализировать траектории моделирования с помощью специализированных инструментов (VMD, PyMOL, MDAnalysis, MDTraj);
- интерпретировать результаты моделирования в терминах физико-химических свойств системы;
- оценивать сходимость и достоверность полученных данных;
- строить и визуализировать энергетические профили, карты плотности, динамические домены и конформационные изменения.

владеть:

- навыками работы с командной строкой и средами высокопроизводительных вычислений (HPC);
- навыками программирования на Python (или других языках) для автоматизации обработки данных и анализа результатов;
- навыками использования графических программ для визуализации молекул и траекторий (PyMOL, VMD, Chimera);
- навыками подготовки научных отчётов, презентаций и публикаций на основе результатов моделирования;
- навыками критической оценки литературных данных, полученных методами молекулярного моделирования.

2. Перечень планируемых результатов обучения

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) при проведении учебных занятий в форме контактной работы обучающихся с педагогическими работниками Университета и в форме самостоятельной работы обучающихся:

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)
УК-1.	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1.	Знает основные принципы системного подхода и методы критического анализа, а также теоретические основы стратегического планирования и принятия решений
		УК-1.2.	Умеет применять методы системного анализа для выявления ключевых проблемных ситуаций, формулировать гипотезы и разрабатывать альтернативные стратегии действий на основе полученных данных
		УК-1.3.	Имеет практический опыт в проведении анализа реальных проблемных ситуаций в рамках проектов, способен вырабатывать и обосновывать стратегии действий, учитывая различные аспекты и последствия
УК-2.	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.1.	Знает основные методологии управления проектами, ключевые этапы жизненного цикла проекта и инструменты для планирования и контроля
		УК-2.2.	Умеет разрабатывать проектную документацию, устанавливать цели и задачи проекта, а также эффективно распределять ресурсы и управлять рисками на всех этапах его реализации
		УК-2.3.	Имеет практический опыт в управлении реальными проектами, включая планирование, исполнение и завершение, а также в оценке результатов и проведении анализа успешности проекта
ПК-1.	Способен определять общие формы и закономерности области искусственного	ПК-1.1.	Знает основные теоретические концепции и принципы искусственного интеллекта в биотехнологии, а также методы

	интеллекта в биологии, медицине или биотехнологии, обрабатывать и интерпретировать данные биологических исследований		обработки, анализа и визуализации данных в биологии, медицине или биотехнологии
		ПК-1.2.	Умеет проводить систематический анализ области профессиональной деятельности, выявлять закономерности и тенденции, моделировать основные биологические процессы и интерпретировать полученные результаты с использованием методов биоинформатики и искусственного интеллекта
		ПК-1.3.	Имеет практический опыт работы в области искусственного интеллекта в биотехнологии, включая участие в научных проектах, исследованиях или практических заданиях
ПК-2.	Способен математически корректно ставить и решать естественнонаучные и прикладные задачи в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-2.1.	Знает основные методы математического моделирования и теоретические основы современной биологии и биоинформатики, необходимые для корректной постановки задач
		ПК-2.2.	Умеет формулировать математические модели биологических процессов, выбирать адекватные методы решения и интерпретировать результаты в профессиональном контексте
		ПК-2.3.	Имеет практический опыт постановки и решения прикладных задач с использованием методов ИИ в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-3.	Способен решать задачи профессиональной деятельности и применять методы искусственного интеллекта в прикладных и фундаментальных исследованиях в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-3.1.	Знает принципы и методы решения профессиональных задач, включая применение профильно-специализированных знаний в области ИИ для фундаментальных и прикладных исследований в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-3.2.	Умеет применять математические и компьютерные методы, формулировать результаты и анализировать их последствия для научных и практических решений

		ПК-3.3.	Имеет опыт участия в проектах, где методы ИИ применялись для решения исследовательских и прикладных задач в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-5.	Способен передавать результаты прикладных задач в виде профессиональных рекомендаций в области искусственного интеллекта, биоинформатики и биотехнологии	ПК-5.1.	Знает методы формулирования рекомендаций и терминологию области искусственного интеллекта и биоинформатики
		ПК-5.2.	Умеет интерпретировать результаты анализа и моделирования и формулировать рекомендации для практического применения в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-5.3.	Имеет опыт разработки рекомендаций по результатам проектов в области искусственного интеллекта и биотехнологии

3. Тематический план

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Трудоемкость, академические часы				ТКУ (текущий контроль успеваемости)
		Очная форма				
		Аудиторная работа		Контроль	Самостояте льная работа	
		Лекции	Семинары (практичес кие занятия)			
1	Основы молекулярного моделирования и классические методы	9	9		14	Домашнее задание Тест Мини-проект
2	Квантовые и статистические методы	7	7		12	Домашнее задание Тест Мини-проект
3	Подготовка, выполнение и анализ симуляций	7	7		11	Домашнее задание Тест Мини-проект
4	Применение и инструменты для биомолекул	7	7		11	Домашнее задание Тест Мини-проект
	Экзамен			6		
Итого:		30	30	6	48	
Объем дисциплины (модуля) (в ак. ч.)		114				
Объем дисциплины (модуля) (в зач. ед.)		3				

4. Содержание дисциплины (модуля)

№п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Содержание дисциплины (модуля) по темам
1	Основы молекулярного моделирования и классические методы	Введение в молекулярное моделирование Основы классической молекулярной механики Силовые поля в молекулярном моделировании Метод молекулярной динамики (МД) Термостаты и баростаты в МД Сolvatация и модели растворителей
2	Квантовые и статистические методы	Квантово-химические методы в моделировании Гибридные методы QM/MM Метод Монте-Карло: основы и применение
3	Подготовка, выполнение и анализ симуляций	Подготовка системы для моделирования Анализ траекторий молекулярной динамики Оценка термодинамических свойств и свободной энергии
4	Применение и инструменты для биомолекул	Моделирование биомолекул: белки, ДНК, РНК, мембраны Программные пакеты для молекулярного моделирования Визуализация и интерпретация результатов

5. Учебно-методическое обеспечение

Университет располагает полным набором лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, включая продукты отечественного производства.

Каждый студент в течение всего периода обучения получает индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечной системе и электронной информационно-образовательной среде университета. Эти системы предоставляют возможность доступа к ресурсам из любой точки, где есть подключение к сети Интернет, как на территории университета, так и за его пределами.

Студентам обеспечен удаленный доступ к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам.

Основная литература:

1. Костюков, В. В. Молекулярная механика биополимеров : монография / В.В. Костюков. — Москва : ИНФРА-М, 2025. — 140 с. — (Научная мысль). — DOI 10.12737/1010677. - ISBN 978-5-16-014913-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2178245/>

2. Нельсон, Д. Основы биохимии Ленинджера : в 3 т. Т. 1 : Основы биохимии, строение и катализ : учебник / Д. Нельсон, М. Кокс ; пер.с англ. под ред. Н. Б. Гусева. - 5-е изд., перераб. и доп. - Москва : Лаборатория знаний, 2022. - 746 с. - ISBN 978-5-93208-607-0. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/2031747>.

Дополнительная литература:

1. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул : монография / Я. В. Диченко ; Национальная академия наук Беларуси, Институт биоорганической химии. - Минск : Беларуская навука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2142984>.

6. Материально-техническое обеспечение

Университет располагает материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работ обучающихся, предусмотренных учебным планом.

Помещения, которые представляют собой учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского (практического) типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования. Помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Изучение дисциплины (модуля) обеспечивается в учебных аудиториях, оснащенных:

- столами и стульями;
- компьютерной техникой;
- механическими калькуляторами;

— специализированным оборудованием, включая демонстрационное оборудование.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, в том числе приспособленные для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья, оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Обучающимся предоставляется доступ (в том числе удаленный) к ресурсам информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронным ресурсам (в том числе электронным библиотечным системам, современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам):

№	Наименование портала (издания, курса, документа)	Ссылка
1.	Научная электронная библиотека elibrary.ru библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp
2.	База данных для IT-специалистов	https://habr.com
3.	База данных ScienceDirect	https://www.sciencedirect.com
4.	Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации	https://minobrnauki.gov.ru/
5.	Федеральный портал «Российское образование»	https://www.edu.ru/
6.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"	http://window.edu.ru/
7.	Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов	http://school-collection.edu.ru/
8.	Федеральный центр информационно - образовательных ресурсов	http://fcior.edu.ru/

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), в том числе комплект лицензионного программного обеспечения, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

Наименование ПО	Производство	Лицензионное / свободно распространяемое
Операционные системы:		
Microsoft Imagine (Windows Client, Server)	зарубежное	лицензионное
Браузеры:		
Яндекс.Браузер	отечественное	свободно распространяемое
Google Chrome	зарубежное	свободно распространяемое
Офисные приложения:		
Microsoft Imagine (Visio, OneNote)	зарубежное	лицензионное
TeXstudio	зарубежное	свободно распространяемое
Adobe Acrobat Reader	зарубежное	свободно распространяемое
Программное обеспечение для планирования и учета времени:		
Toggle app	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления проектами:		
Microsoft Imagine (Project)	зарубежное	лицензионное

Системы управления базами данных:		
Microsoft Imagine (SQL Server)	зарубежное	лицензионное
Системы резервного копирования (backup):		
Acronis Backup Advanced for HyperV	зарубежное	лицензионное
Справочно-правовые системы:		
КонсультантПлюс: справочно-правовая система	отечественное	лицензионное
Средства антивирусной защиты:		
Kaspersky Endpoint Security для бизнеса Стандартный Russian Edition	отечественное	лицензионное
Среды разработки:		
Visual Studio Code	зарубежное	свободно распространяемое
Bash (Unix shell)	зарубежное	свободно распространяемое
Anaconda	зарубежное	свободно распространяемое
Robotic Operating System	зарубежное	свободно распространяемое
CorolliaSim	зарубежное	свободно распространяемое
Google Colaboratory	зарубежное	свободно распространяемое
Пакеты программных средств и библиотек:		
AutoPsy	зарубежное	свободно распространяемое
Interactive Disassembler (IDA)	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления библиографической информацией:		
Zotero	зарубежное	свободно распространяемое
Сервисы и службы:		
Bind	зарубежное	свободно распространяемое
Docker	зарубежное	свободно распространяемое

7. Методические и оценочные материалы

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

В процессе изучения дисциплины (модуля) «Молекулярное моделирование» в рамках текущего контроля успеваемости используются такие виды учебной работы, как лекции, семинары, домашние задания, тесты, мини-проект, а также различные виды самостоятельной работы обучающихся по заданию преподавателя, направленные на развитие навыков профессиональной лексики, закрепление практических профессиональных компетенций, поощрение инициатив.

Лекция – систематическое, последовательное, монологическое изложение преподавателем учебного материала, как правило, теоретического характера.

В процессе лекций рекомендуется вести конспект лекций: кратко и схематично фиксировать основные идеи, выводы и обобщения лекции; выделять важные мысли, ключевые слова и термины. Необходимо отметить вопросы или материалы, которые вызывают затруднения, и попытаться найти ответы в рекомендованной литературе. Если разобраться в материале не удастся, следует сформулировать вопрос и задать его преподавателю на консультации или во время семинарского (практического) занятия.

Семинар – это форма учебной деятельности, проводимая в учебном заведении под
Электронный документ

руководством преподавателя, где студенты активно участвуют в обсуждениях, практических заданиях и других формах взаимодействия.

Для успешной подготовки к семинару рекомендуется заранее ознакомиться с темой занятия и основными материалами, чтобы иметь возможность активно участвовать в обсуждении. Также полезно подготовить вопросы и идеи для обсуждения, что поможет глубже понять материал и продемонстрировать заинтересованность.

Домашнее задание – набор задач по темам недели.

При работе над домашними заданиями важно внимательно ознакомиться с требованиями и сроками выполнения. Рекомендуется разбивать задания на этапы, чтобы избежать перегрузки и лучше усвоить материал, использовать различные источники информации, включая учебники и онлайн-ресурсы, для более глубокого понимания темы.

Тест – особая форма проверки знаний. Проводится после освоения одной или нескольких тем и свидетельствует о качестве понимания основных понятий изучаемого материала. Тестовые задания составлены к ключевым понятиям, основным разделам, важным терминологическим категориям изучаемой дисциплины.

Для подготовки к тесту необходимо знать терминологический аппарат дисциплины, понимать смысл научных категорий и уметь их использовать в профессиональной лексике. Владение понятийным аппаратом, включённым в тестовые задания, позволяет преподавателю быстро проверить уровень понимания студентами важных методологических категорий.

Мини-проект — это краткосрочная практическая работа в малых группах на семинарах, направленная на применение теоретических знаний для решения конкретных задач.

В ходе мини-проекта студенты проводят анализ проблемы, разрабатывают техническое решение и представляют результаты в виде отчета, модели или презентации. Такой формат способствует развитию навыков самостоятельной работы, критического мышления и командного взаимодействия.

Самостоятельная работа – работа студентов, направленная на углубленное изучение отдельных тем и вопросов учебной дисциплины (модуля).

В процессе самостоятельной работы студенты взаимодействуют с рекомендованными материалами при минимальном участии преподавателя. Задачи студента включают работу с конспектами лекций (обработка текста), повторное изучение учебных материалов планов и тезисов ответов, изучение дополнительных тем, выполнение учебно-исследовательских заданий и другое.

Система оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Критерии получения уровня и оценивания сформированности компетенций по дисциплине (модулю) «Молекулярное моделирование»

Оценивание уровня учебных достижений обучающихся по дисциплине (модулю) осуществляется в виде текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю) осуществляется в форме **экзамена**, при этом проводится оценка компетенций, сформированных по дисциплине.

Для оценивания текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации используется десятибалльная шкала оценивания, которая соотносится с традиционной пятибалльной шкалой следующим образом, если иное не указано в syllabusе дисциплины:

Десятибалльная оценка	Пятибалльная оценка	Общая характеристика результата обучения по дисциплине (модулю)
10	Отлично	Студент полностью владеет знаниями, изложенными в рабочей программе, и глубоко осмысляет дисциплину. Он самостоятельно и логически последовательно отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее важном. Умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя ключевые моменты и устанавливая причинно-следственные связи. Четко формулирует ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования, необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты дисциплины (модуля) с практическими задачами.
9	Отлично	
8	Отлично	
7	Хорошо	Студент обладает знаниями предмета почти в полном объеме рабочей программы и самостоятельно, логически последовательно и всесторонне отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее значимых моментах. Он умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя его ключевые аспекты и устанавливая причинно-следственные связи. Формулирует свои ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные ситуационные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования, необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты предмета с практическими задачами.
6	Хорошо	
5	Удовлетворительно	Студент обладает базовыми знаниями по дисциплине, но испытывает трудности при самостоятельных ответах и использует неточные формулировки. В ходе ответов он допускает ошибки, касающиеся сути вопросов. Студент способен решать только самые простые задачи и владеет лишь минимальным набором методов исследования.
4	Удовлетворительно	
3	Не сдан	Студент не овладел обязательным минимумом знаний по предмету и не может ответить на вопросы, даже если преподаватель задает дополнительные наводящие вопросы.

Дисциплина (модуль) «Молекулярное моделирование» оценивается следующим образом:

Активность	Вес	Количество	Описание
Домашние задания	20%	10	Набор задач по темам недели
Тесты	15%	10	Форма проверки знаний студентов через ответы на вопросы с выбором из нескольких вариантов ответов

Активность	Вес	Количество	Описание
Мини-проект	25%	1	Краткосрочная практическая работа в малых группах на занятиях, направленная на решение конкретных задач
Экзамен	40%	1	Письменная или устная работа над заданием, направленным на проверку полученных знаний и навыков по дисциплине (модулю)

Формула расчёта итоговой оценки по дисциплине (модулю) «Молекулярное моделирование»: $\langle 0,2 \times \text{Среднее за домашние задания} + 0,15 \times \text{Среднее за тесты} + 0,25 \times \text{Мини-проект} + 0,4 \times \text{Экзамен} \rangle$.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)

Примерные домашние задания

Домашнее задание 1. Подготовка системы для молекулярной динамики

1. Скачайте структуру белка (например, PDB-код 1UBQ — убиквитин) из Protein Data Bank.
2. Очистите структуру: удалите воды, лиганды, исправьте отсутствующие атомы (с помощью PyMOL или Chimera).
3. Добавьте водороды, задайте протонный статус остатков (pH 7.4), присвойте заряды.
4. Поместите молекулу в водную среду (сфера или куб с TIP3P-водой), добавьте ионы для нейтрализации заряда.
5. Оформите отчёт: шаги подготовки, используемые инструменты, скриншоты системы до и после сольватации.

Домашнее задание 2. Анализ траектории молекулярной динамики

1. Используя готовую траекторию (или сгенерированную на предыдущем этапе), проанализируйте:
 - RMSD (среднеквадратичное отклонение) от начальной структуры,
 - RMSF (флуктуации по остаткам),
 - количество водородных связей внутри белка,
 - радиус инерции.
2. Постройте графики зависимостей от времени (с помощью Python, xmgrace или VMD).
3. Определите, достигнута ли стационарность (equilibration), и укажите стабильные и подвижные участки белка.
4. Оформите результаты в виде графиков и краткого аналитического вывода.

Домашнее задание 3. Сравнение силовых полей

1. Выберите две модели силовых полей (например, AMBER и CHARMM).
2. Опишите различия в параметризации:
 - типы валентных и нековалентных взаимодействий,
 - подходы к учёту электростатики и ван-дер-ваальсовых сил,
 - рекомендуемые области применения.

3. Объясните, почему выбор силового поля критичен для моделирования белков, ДНК или липидных мембран.
4. Приведите примеры пакетов, поддерживающих каждое силовое поле.
5. Оформите ответ в виде сравнительной таблицы и заключения.

Примерные задания для теста

Вопрос 1.

Какое уравнение лежит в основе классической молекулярной динамики?

1. Уравнение Шрёдингера
2. Уравнение Ньютона ($F = ma$)
3. Уравнение состояния идеального газа
4. Уравнение диффузии

Правильный ответ: 2

Вопрос 2.

Какой метод используется для поддержания постоянной температуры в системе при моделировании?

1. Баростат
2. Пиростат
3. Термостат (например, Берендсена или Носе–Хувера)
4. Электростат

Правильный ответ: 3

Вопрос 3.

Какой тип взаимодействия описывается потенциалом Леннарда-Джонса?

1. Ковалентные связи
2. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия
3. Ионные связи
4. Водородные связи

Правильный ответ: 2

Вопрос 4.

Какой программный пакет чаще всего используется для моделирования биомолекул методом молекулярной динамики?

1. Gaussian
2. GROMACS
3. BLAST
4. PyMOL

Правильный ответ: 2

Вопрос 5.

Что означает RMSD при анализе траектории?

1. Среднее значение энергии
2. Среднеквадратичное отклонение конформаций от эталона
3. Число водородных связей
4. Плотность системы

Правильный ответ: 2

Примерное описание задания и критерии оценивания к мини-проекту

Выполните вычислительный эксперимент по моделированию белка методом молекулярной динамики на коротком временном интервале (1–5 нс).

Цель — проанализировать стабильность структуры, динамику отдельных участков и ключевые межмолекулярные взаимодействия.

Этапы проекта:

- Выбор белка (например, убиквитин, лизоцим).
- Подготовка структуры: очистка, добавление атомов, сольватация, нейтрализация.
- Настройка параметров симуляции: силовое поле (AMBER/CHARMM), термостат, баростат, длительность.
- Запуск минимизации, нагрева, уравнивания и production-фазы (в GROMACS или другом пакете).
- Анализ траектории: RMSD, RMSF, водородные связи, визуализация конформационных изменений.
- Оформление результатов: отчёт или презентация с графиками, выводами, скриншотами.

Формат: письменный отчёт (5–7 стр.) или презентация (8–10 слайдов).

Критерии оценивания:

- Корректность подготовки системы — правильно выполнена очистка, параметризация, сольватация и нейтрализация.
- Правильность настройки симуляции — адекватный выбор силового поля, термостата, длительности этапов.
- Глубина и точность анализа — построены и интерпретированы ключевые графики (RMSD, RMSF и др.), сделаны содержательные выводы.
- Качество визуализации и оформления — наличие схем, графиков, читаемость, структурированность.
- Научная аргументация и критическое осмысление — обоснованность выводов, оценка достоверности, указание ограничений моделирования.

Задания для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

№ п/п	Задание	Ответ	Компетенция
1.	Что такое силовое поле в молекулярной динамике?	Набор параметров и уравнений, описывающих взаимодействия между атомами	УК-1
2.	Какое взаимодействие описывает кулоновский потенциал?	Электростатическое	УК-2
3.	Какой метод учитывает квантовые эффекты в части системы?	QM/MM	ПК-1

4.	Что означает термин "сольватация"?	Окружение молекулы молекулами растворителя (например, воды)	ПК-2
5.	Какой инструмент используется для визуализации траекторий?	VMD	ПК-3
6.	Что такое RMSF?	Среднеквадратичные флуктуации атомов или остатков	ПК-5
7.	Какой пакет используется для квантово-химических расчётов?	Gaussian	УК-1
8.	Что такое термостат в МД?	Алгоритм поддержания постоянной температуры	УК-2
9.	Какой метод позволяет оценить свободную энергию?	Метод термодинамической интеграции или MMPBSA	ПК-1
10.	Что такое production-фаза в МД?	Основная фаза симуляции для сбора данных	ПК-2
11.	Какой формат часто используется для хранения траекторий?	.xtc или .dcd	ПК-3
12.	Что описывает потенциал гармонической связи?	Валентные колебания связей	ПК-5
13.	Какой метод использует случайные выборки для расчёта свойств системы?	Метод Монте-Карло	УК-1
14.	Какой параметр отвечает за плотность системы?	Баростат	УК-2
15.	Что такое free energy landscape?	Карта свободной энергии в зависимости от реакционной координаты	ПК-1
16.	Какой пакет поддерживает силовое поле OPLS?	GROMACS	ПК-2
17.	Что показывает радиус инерции?	Компактность молекулы	ПК-3

18.	Какой тип анализа выявляет гибкие участки белка?	RMSF	ПК-5
19.	Какой инструмент позволяет автоматизировать анализ траекторий на Python?	MDAnalysis или MDTraj	УК-1
20.	Что такое equilibration в МД?	Этап уравновешиван ия системы перед основным моделирование м	УК-2