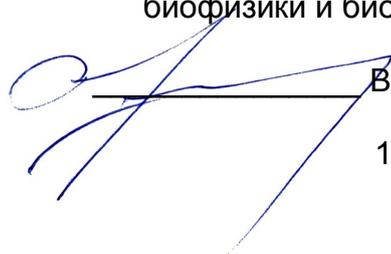


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВПО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой
биофизики и биотехнологии



В.Г. Артюхов

15.05.2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.02.01. Компьютерное моделирование биофизических процессов

- 1. Шифр и наименование специальности:**
06.06.01 Биологические науки
- 2. Направленность:** биофизика
- 3. Квалификация (степень) выпускника:**
исследователь, преподаватель-исследователь
- 4. Форма образования:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:**
биофизики и биотехнологии
- 6. Составители программы:**
Колтаков Игорь Александрович, канд. биол. наук, доцент
- 7. Рекомендована:** Ученым советом биолого-почвенного факультета,
протокол № 2 от 15.05.2019 г.
- 8. Учебный год:** 2022/2023 **Семестр 7**

9. Цели и задачи учебной дисциплины: Основной целью курса является изучение основ компьютерного моделирования и анализа ряда биофизических процессов и биомакромолекул. Освоение базовых методов построения математических и компьютерных моделей, инструментов квантово-химического и молекулярно-динамических методов для исследования структурных свойств биологических структур (ДНК, РНК и протеины) в растворах и различных средах, влияния различных физико-химических агентов на их структурно-функциональное состояние.

10. Место учебной дисциплины в структуре ППО: Курс компьютерного моделирования биофизических процессов требует от аспирантов знаний в области высшей математики, информатики, биохимии, молекулярной биологии, основ системного анализа и др..

11. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины:

Особенностью совокупности компетенций, на достижение которых направлена программа «Компьютерное моделирование биофизических процессов» является нацеленность на практическое использование новейших средств моделирования, при решении конкретных задач в области молекулярной биологии и биофизики и биохимии.

ОК 1, 2, 3, 6

ПК 1, 2, 4, 6, 9, 10, 13, 15, 16

12. Структура и содержание учебной дисциплины:

12.1 Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 2 / 72.

12.2 Виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)
Аудиторные занятия	4
в том числе: лекции	4
практические	
лабораторные	
Самостоятельная работа	68
Итого:	72

12.3 Содержание разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Вид учебной работы
1	Введение	Понятие модели. Объекты, цели и методы моделирования. Модели в разных науках. Компьютерные и математические модели. История первых моделей в биологии. Современная классификация моделей биологических процессов. Регрессионные, имитационные, качественные модели. Принципы имитационного моделирования и примеры моделей. Специфика моделирования живых систем. Формализация данных. Понятие	Лекция, самостоятельная работа.

		стационарного состояния и его устойчивости	
2	Модели динамики численности популяций.	Модели роста популяций. Экспоненциальный рост. Логистический рост. Модели с наименьшей критической численностью.	Самостоятельная работа, лекция.
3	Модели устойчивости стационарных состояний нелинейных систем..	Дискретные модели: устойчивый рост, циклы, динамический хаос. Модели с запаздыванием. Вероятностные модели. Матричные модели популяций. Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений. Фазовая плоскость. Типы особых точек: узел, фокус, седло, центр. Параметрический портрет системы для типов устойчивости системы двух уравнений. Исследование устойчивости стационарных состояний нелинейных систем второго порядка. Пример: система линейных уравнений для химических реакций. Примеры: Системы уравнений Лотки и Вольтерра.	Самостоятельная работа.
4	Иерархия времен в биологических системах. Модели мультистационарных систем.	Быстрые и медленные переменные. Теорема Тихонова. Мультистационарные системы. Фазовый портрет триггерной системы. Типы переключения триггера. Отбор одного из равноправных видов при наличии неограниченных и ограниченных ресурсов. Триггер Жакоба и Моно.	Самостоятельная работа.
5	Колебания в биологических системах.	Понятие автоколебаний и предельного цикла. Бифуркация Хопфа рождения предельного цикла. Модель Брюсселятора. Колебания в темновых процессах фотосинтеза. Колебания в гликолизе. Колебания кальция.	Самостоятельная работа.
6	Квазистохастическое поведение динамических систем.	Динамический хаос. Пространственно-динамический хаос в моделях кардиологии. Сердечные аритмии. Модель нелинейной системы трансмембранного переноса ионов. Типы поведения системы: затухающие колебания, триггер, автоколебания. Поведение системы в присутствии переменного электрического поля. Резонансные свойства.	Самостоятельная работа, лекция.
7	Модели распределенных систем.	Распределенные системы. Активные автоволновые среды. Уравнение диффузии. Решение уравнения диффузии. Система реакция-диффузия. Неустойчивость гомогенного стационарного состояния. Распространение волны в системах с диффузией. Система реакция-диффузия для двух уравнений. Исследование устойчивости гомогенного стационарного состояния. Типы неустойчивостей. Распределенная система	Самостоятельная работа.

		«Брюсселятор» как модель активной среды. Реакция Белоусова-Жаботинского.	
8	Моделирование метаболических путей.	Стехиометрические и динамические модели. Анализ баланса метаболических потоков. Использование баз данных для построения метаболических моделей	Самостоятельная работа.
9	Моделирование взаимодействий в бионаноструктурах.	Моделирование взаимодействий в бионаноструктурах. Модели молекулярной динамики. Принципы построения и примеры. Модели броуновской динамики. Модели переноса электрона в комплексах молекул-переносчиков. Кинетические и прямые многочастичные модели процессов в фотосинтетической мембране.	Самостоятельная работа, лекция.

12.4 Междисциплинарные связи с другими дисциплинами:

Курс компьютерного моделирования биофизических процессов требует от аспирантов знаний в области высшей математики, информатики биохимии, молекулярной биологии.

12.5 Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение.	1			4	5
2	Модели динамики численности популяций.	1			6	7
3	Модель устойчивости стационарных состояний нелинейных систем.				6	6
4	Иерархия времен в биологических системах. Модели мультистационарных систем.				6	6
5	Колебания в биологических системах.				6	6
6	Квазистохастическое поведение динамических систем.	1			6	7
7	Модели распределенных систем.				6	6
8	Моделирование метаболических путей				8	8
9	Моделирование взаимодействий в бионаноструктурах.	1			20	21
Итого:		4			68	72

13. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

а) основная литература:

№ п/п	Источник
-------	----------

1.	Биофизика / под ред. В.Г. Артюхова — Екатеринбург ; М. : Деловая кн. : Акад. Проект, 2009 .— 293, [1] с.
2.	Теория вероятностей и математическая статистика. Математические модели. / В.Д. Мятлев [и др.]. – М.: Академия, 2009. – 320 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3.	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: Солон-пресс, 2005. –535 с.
4.	Ризниченко Г.Ю. <i>Математические модели в биофизике и экологии</i> / Г.Ю. Ризниченко – М.: ИКИ, 2003. – 184 с.
5.	Тарасевич Ю. Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: Учебное пособие - М.: Эдиториал УРСС, 2001. - 144 с.
6.	Анищенко В.С. Нелинейная динамика хаотических и стохастических систем. / В.С. Анищенко, Т.Е. Вадивасова, В.В. Астахов. – Саратов, Изд-во Саратовского ун-та, 1999, - 368с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
7.	HyperChem® Release 7for Windows®. Getting Started. URL: http://www.chemistry-software.com/pdf/hyperchem_getting_started.pdf

14. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Компьютеры, проекционное оборудование, программное обеспечение: HyperChem, Chemoffice, Matlab, VLISS, Powersim Studio.

15. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

В рамках общего объема часов, отведенных для изучения дисциплины, предусматривается выполнение следующих видов самостоятельных работ аспирантов: самостоятельное изучение теоретического материала с самоконтролем по приведенным ниже вопросам; изучение теоретического материала для выполнения практических заданий; изучение типовых математических схем для построения моделей систем.

Для самостоятельного изучения дисциплины выносятся часть материала по всем темам дисциплины с самоконтролем по контрольным вопросам и возможностью консультации у ведущего преподавателя общим объемом 68 часов.

Для составления отчета по практическим заданиям аспирант должен знать теоретический материал и продемонстрировать навыки по составлению и анализу работы моделей в изучаемых программных пакетах.

19.2. Вопросы для контроля самостоятельной работы:

1. Какие процессы описываются логистическими уравнениями (в экономике, социологии, биологии).
2. Как называется кривая, отображающая на плоскости динамику изменения численности по уравнению Ферхюльста?
3. Какие колебания математического маятника можно считать гармоническими?
4. Какие колебания математического маятника называются нелинейными?

5. Что называется периодическими колебаниями и что называется периодом колебания?
6. Перечислите достоинства и недостатки модели Лотки-Вольтерра.
7. Какова будет динамика популяции жертв (в классической и модифицированной модели Лотки-Вольтерра), если все хищники исчезнут?
8. Какова будет динамика популяции хищников (в классической и модифицированной модели), если все жертвы исчезнут?
10. Что такое автоколебания? Чем автоколебания принципиально отличаются от рассмотренных ранее (например, колебаний маятника)?
11. Что такое предельные циклы? Какие бывают предельные циклы?
12. Какой режим возбуждения колебаний называется жестким (мягким)?
13. Что описывают точечная и распределенная модели?
14. При каком условии в точечной модели особая точка меняет тип (неустойчивый фокус – неустойчивый узел и устойчивый фокус – устойчивый узел)?
15. При каких условиях в распределенной системе возможна самоорганизация?
16. Что такое аттрактор, странный аттрактор? Поясните, что означают аттракторы разных типов: притягивающая точка, предельный цикл, странный аттрактор.
17. Можно ли утверждать, что, воздействуя на реальную систему, модель поведения которой в фазовом пространстве имеет аттракторы типа притягивающая точка и предельный цикл, после воздействия мы вернемся к исходному ее состоянию?
18. С развитием вычислительной техники создавалось впечатление, что, создав суперкомпьютер, можно точно промоделировать поведение любой системы. Зная, что данные, закладываемые в модель реальных процессов, никогда не бывают абсолютно точными, объясните, почему это принципиально невозможно в случае странного аттрактора.
19. В чем смысл константы Фейгенбаума?
20. Какую биологическую систему может описывать модель Ферхюльста?
21. Что описывает модель Ферхюльста?
22. Какими правилами описывается модель Ферхюльста?
23. Что такое клеточный автомат? Какими особенностями обладают клеточные автоматы?
24. Приведите пример вымирающей конфигурации.
25. Приведите пример устойчивой конфигурации.
26. Из скольких клеток состоит минимальная устойчивая конфигурация?
27. Приведите пример периодически меняющейся конфигурации.
28. Приведите пример движущейся конфигурации.
29. Приведите пример конфигурации-генератора.
30. Что описывает модель Винера-Розенблюта?
31. Какими правилами описывается модель Винера-Розенблюта?
32. Какие структуры могут возникать в модели Винера-Розенблюта?
33. В чем отличие и сходство моделей Ва-Тор и Лотки-Вольтерра?
34. В каком случае поведение модели Ва-Тор соответствует логистической кривой? Почему на фазовом портрете кривые не являются гладкими?
35. Каковы недостатки модели Изинга?
36. Какие вещества называются ферромагнетиками и антиферромагнетиками?

37. Что понимают под температурой Кюри и температурой Нееля?

38. Каким образом вычисляется энергия в модели Изинга?

19.3. Критерии аттестации по итогам освоения дисциплины:

Оценка	Критерии оценок
Зачтено	<i>Аспирант должен понимать основные алгоритмы построения компьютерных моделей биосистем и процессов. Знать методы построения моделей и уметь проводить проверку адекватности модели. Овладеть навыками работы в программных пакетах, используемых для построения компьютерных моделей и понимать сущность алгоритмов построения пространственных моделей биомакромолекул.</i>
Не зачтено	<i>Аспирант не понимает основные алгоритмы построения компьютерных моделей биосистем и процессов. Не знает методологического аппарата построения моделей и не умеет проводить проверку адекватности модели. Не овладел навыками работы в программных пакетах, используемых для построения компьютерных моделей.</i>