

Проект комиссии Президента
по модернизации и технологическому развитию экономики России
«Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров
в области суперкомпьютерных технологий и
специализированного программного обеспечения»

УТВЕРЖДАЮ
Председатель экспертного совета
системы НОЦ СКТ, член-корр. РАН
В.В. Воеводин

" _____ " _____ 201__ г.

Программа дисциплины

«Моделирование биологических систем на GPU»

«010900 -- Прикладные математика и физика»

Разработчик: к. ф.-м. н. В.А. Барсегов

Москва

Учебно-методический план курса лекций

«МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА GPU» БАРСЕГОВ В.А.

1. Аннотация курса

Излагаются основы биологических систем и молекулярной динамики. В рамках биологических систем описываются первичная и вторичная структуры белка, фундаментальные биологические процессы. Излагаются необходимые численные методы молекулярного моделирования биологических систем и их реализация на графическом процессоре.

Целями освоения дисциплины «МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА GPU» являются ознакомление слушателей, специализирующихся в области моделирования биологических систем, с современными высокопроизводительными вычислительными системами, с численными методами молекулярного моделирования и их реализацией на GPU.

Курс разработан профессором Массачусетского Университета, приглашенным ученым Московского физико-технического института (государственный университет).

Автор программы к. ф.-м. н. В.А. Барсегов. При чтении лекций используются компьютерные презентации.

2. Место дисциплины в учебном плане.

В результате изучения дисциплины слушатель должен:

- Знать суперкомпьютерную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности (в области моделирования биологических систем на GPU), и применять соответствующий физико-математический аппарат для их формализации, анализа и выработки решения;
- эффективно участвовать в проведении экспериментально-исследовательских работ при аттестации системы защиты информации с учетом требований к уровню защищенности компьютерной системы;
- Уметь применять математический аппарат с использованием компьютерной техники для решения профессиональных задач;

3. Содержание дисциплины.

В курсе «МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА

GPU» излагаются основы биологических систем и молекулярной динамики. В рамках биологических систем описываются первичная и вторичная структуры белка, фундаментальные биологические процессы. Излагаются необходимые численные методы молекулярного моделирования биологических систем и их реализация на графическом процессоре.

4. Перечень разделов курса

Моделирование биологических систем на GPU

1. Биологические системы и их свойства
2. Фундаментальные биологические процессы
3. Методы численного моделирования биологических систем
4. Реализации численных методов молекулярного моделирования
5. Структура программных реализаций молекулярной динамики
6. Эксперимент, моделирование и теория
7. Продвинутое методы молекулярной динамики

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.

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

Методы численного моделирования биологических систем. Молекулярная динамика в полноатомном разрешении в явном и неявном растворителе, динамика Ланжевена. Молекулярное силовое поле, аппроксимации.

Реализации численных методов молекулярного моделирования. Уравнения Ньютона и Ланжевена. Случайные числа. Численное интегрирование уравнений движения на ЦП и ГП. Ковалентные взаимодействия: реализации расчета сил на ЦП и на ГП. Невалентные взаимодействия: задача N тел. Методы оптимизации алгоритмов на ГП. Подход «параллелизация 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 «параллелизация по взаимодействующим тройкам частиц».

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.

Эксперимент, моделирование и теория. Эксперименты на единичных молекулах АСМ и их моделирование. Сложность в сопоставлении данных экспериментов с результатами моделирования. Упрощенные модели. Процесс Орнштейна-Уленбека. Расчет температуры через распределение Максвелла-Больцмана. Расчет давления и объема системы. Модель цепи Рауса. Модели воды.

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

5. Тематический план курса.

Распределение часов курса по темам и видам работ представлено в таблице 1

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Трудоемкость	Всего часов в том числе				Форма контроля
			Аудиторные занятия			Самостоятельная работа	
			Всего	Лекции	Практические занятия		
1.	Биологические системы	18	14	8	6	4	Тест
1.1.	Строение различных биологических систем. Первичная и вторичная структуры белка. Различные типы аминокислот.	4	4	2	2	0	
1.2.	Фундаментальные биологические процессы. Фолдинг, денатурация, образование и распад белок-белковых комплексов.	4	4	4	0	0	
1.3.	Объемные структуры белков. Базы данных белковых структур.	4	4	2	2	0	
1.4.	Типы файлов, используемые для описания белковых структур. Визуализация при помощи программы VMD.	6	2	0	2	4	
2.	Молекулярная динамика	16	16	12	4	0	
2.1.	Методы молекулярной динамики. Потенциальная функция, силовое поле.	4	4	4	0	0	
2.2.	Программные реализации для расчета молекулярной динамики. Минимизация энергии, нагрев системы и равновесное моделирование.	8	8	4	4	0	
2.3.	Методы молекулярной динамики, используемые для разрешения конфигурационного пространства: метод обмена репликами (REMD) и метод зонтичного сканирования конфигурационного пространства. Методы Монте-Карло.	4	4	4	0	0	
3.	Численные методы молекулярного моделирования и их реализация на графическом процессоре	16	12	0	12	4	Тест

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Всего часов					Форма контроля
		Трудоёмкость	в том числе				
			Аудиторные занятия			Самостоятельная работа	
			Всего	Лекции	Практические занятия		
3.1.	Интеграция уравнений движения Ньютона и Ланжевена. Случайные числа.	2	2	0	2	0	
3.2.	Расчет сил взаимодействия через ковалентные связи	2	2	0	2	0	
3.3.	Невалентные взаимодействия. Задача N тел. Списки соседей.	8	4	0	4	4	
3.4	Расчет сил потенциала вибрации углов между ковалентными связями	4	4	0	4	0	
4.	Применение методов молекулярного моделирования	12	6	4	2	6	Тест
4.1.	Процесс Орнштейна-Уленбека: расчет зависимости смещения частицы от времени. Расчет температуры через распределение Максвелла-Больцмана.	4	2	2	0	2	
4.2.	Модель цепи Рауса. Получение распределения расстояний между концами цепи, а также его зависимости от силы внешнего воздействия.	4	2	2	0	2	
4.3.	Уравнение состояния газа	4	2	0	2	2	
5.	Курсовой проект	24	0	0	0	24	Тест
	ИТОГО:	72	48	24	24	24	

Таблица 1

6. 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. Трифонов, Я. А. Холодов и А. С. Холодов, “Моделирование микромеханики биомолекул на графиче-

ских 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.