Тема научной работы и курсовые работы для студентов 1-3 курсов физического факультета.

Преподаватель – Андрей Владимирович Комолкин, доцент отдела Квантовых магнитных явлений кафедры Ядерно-физических методов исследования:
a.komolkin@spbu.ru
http://nmr.phys.spbu.ru/~komolkin

«Исследование биологических молекул методами компьютерного моделирования молекулярной динамики и магнитного резонанса»

Активность молекул зависит от их пространственного строения, т. е. от расположения атомов в пространстве и от возможности их взаимодействия с атомами других молекул. В естественной физиологической среде—в растворе—молекулы двигаются настолько быстро, что экспериментальными методами «сфотографировать» их невозможно. Экспериментальные методы наблюдения дают физикам усреднённую картину строения и поведения молекул.

Использование математических моделей молекул и проведение моделирования их движения на компьютерах позволяют детально изучать движение атомов и их взаимное расположение, а сравнение результатов с экспериментальными данными позволяет делать достоверные выводы о строении и поведении этих веществ.

1) Курсовая работа **«Построение моделей биологических молекул и изучение метода молекулярной динамики»**. Не связана с программированием, но с моделированием.

В данной работе студент вспоминает (изучает) основы пространственного строения органических молекул, строит пространственную модель одной из выбранных преподавателем молекул (аминокислота или фрагмент белка, органическая молекула), изучает основные этапы моделирования молекул, выполняет моделирование водного раствора этого вещества, анализирует полученные данные и представляет результаты и выводы о строении раствора в конце семестра.

Курсовая работа связана с использованием компьютера для моделирования с помощью имеющихся пакетов программ, для визуализации молекул, для анализа структуры молекул. На данном этапе может быть использован стационарный или переносной (ноутбук) компьютер, т. к. не предполагается долгая загрузка процессора.

Развитие работы на следующих курсах связано с углублённым изучением метода молекулярной динамики (2-3 курсы), экспериментальных методов магнитного резонанса (3-4 курсы), созданием своих моделей биологически активных молекул (1-3 курсы), проведением компьютерного моделирования (1-4 курсы) и экспериментальных исследований (3-4 курсы) растворов молекул, анализом результатов (по ходу исследования) и защитой бакалаврской работы. Для компьютерного моделирования понадобятся мощные многопроцессорные компьютеры со специальными сопроцессорами («графическими картами», GPU), которые имеются в Вычислительном центре СПбГУ, эксперименты будут проводиться на спектрометрах в Ресурсном центре Магнитно-резонансных методов исследования.

2) Курсовая работа **«Знакомство с методом магнитного резонанса и его применением в биологии и медицине»**. Экспериментальная работа.

В этой работе студент должен будет изучить основы метода магнитного резонанса на уровне классической физики и выполнить ряд экспериментов, подтверждающих и закрепляющих полученные теоретические знания. В работе необходимо будет приготовить образцы, на которых будут проведены эксперименты по измерению времён релаксации намагниченности. Например, образец может содержать воду и масло (несмешивающиеся жидкости). Полученные численные данные надо будет обработать с помощью имеющихся программ и показать, что параметры сигналов магнитного резонанса правильно отражают содержание веществ в образцах.

Данная курсовая работа может быть выполнена на аппаратуре, находящейся в отделе Квантовых магнитных явлений кафедры ЯФМИ, а данные обработаны на персональном компьютере.

В дальнейшем студент будет изучать метод магнитного резонанса (факультативно на 1-2 курсах и серьёзно на 3-4 курсах), методы моделирования молекул (квантовой химии на 4 курсе, молекулярной динамики на 2-3 курсе), проводить экспериментальные исследования растворов и смесей биологических молекул и выполнять моделирование с помощью пакетов программ на суперкомпьютерах. Конкретные вещества для выполнения бакалаврской работы будут выбраны на 3-ем или в начале 4-ого курса.

3) Курсовая работа **«Построение бесконечной 3-мерной модели цеолита для моделирования молекулярной динамики»**. Возможно выполнять две работы с разными цеолитами, не связана с программированием.

Цель работы – построение модели цеолита, внутри пор которого будет в дальнейшем исследоваться поведение различных низкомолекулярных веществ (вода, метанол, углекислота и др.). Первое, что студент должен будет изучить при работе над курсовой, это нанопористые структуры, цеолиты. Далее студент должен будет построить модель цеолита (структуру преподаватель выберет для каждого студента отдельно). Модель должна быть «бесконечной», т. е. создавать впечатление, что кристалл простирается бесконечно во всех трёх измерениях. Это достигается с помощью применения периодических граничных условий. Эти условия и другие аспекты построения компьютерных моделей для метода молекулярной динамики студент должен будет изучить перед построением модели цеолита.

В дальнейшем работа будет связана с изучением поведения веществ в порах цеолита и с модификацией цеолита для придания ему особых (например, каталитических) свойств.

4) Курсовая работа **«Разработка и реализация алгоритма для объединения 3-мерных томограмм КТ и МРТ (image fusion)»**. Связана с программированием и экспериментами по томографии.

Тематика «image fusion» является одной из актуальных в современной клинической диагностике. В работе мы не будем связаны с реальной диагностикой, но задача буде состоять в разработке алгоритма совмещения двух томограмм, полученных разными методами – КТ и МРТ. Такое совмещение позволит объединить в одном изображении все достоинства каждого из методов исследования и нивелировать их недостатки.

Алгоритм необходимо будет реализовать на одном из языков программирования (надо выбрать,

какой из них обладает более богатой библиотекой чтения и записи томограмм), с возможностью просмотра синтезированной томограммы на медицинских приборах с помощью установленных там «стандартных» программ, к которым привыкли врачи-рентгенологи.

Работа также связана с изучением стандарта файлов DICOM, регистрацией томограмм модельных объектов и выбора контрастных веществ для исследований.

5) Курсовая работа **«Разработка и адаптация программ анализа данных молекулярного моделирования для пакета GROMACS»**. Связана с программированием и моделированием.

А. В. Комолкин разработал ряд программ для анализа данных молекулярной динамики. Они реализуют авторские методы анализа. Программы разработаны для пакета АКМД (Андрея Комолкина Молекулярная Динамика). В курсовой предполагается реализовать эти методы для анализа данных в пакете GROMACS. В дальнейшем планируется сделать этот код открытым и поддерживать его.

В первую очередь планируется реализовать метод построения функций цилиндрического распределения (Cylindrical Distribution Functions, CDF), необходимых для текущего проекта научного руководителя.

Развитие этой курсовой может быть в области моделирования молекулярной динамики в пакете GROMACS. Молекулярные системы, которые будут моделироваться, будут выбираться по мере их появления в научной группе.

6) Курсовая работа **«Исследование распределения электронной плотности в водных растворах простых солей методом квантовой химии»**. Не связана с программированием, но с большими вычислительными экспериментами на супер-ЭВМ.

Метод квантовой химии является одним из важнейших методов моделирования молекул. Он позволяет исследовать электронное строение как отдельных молекул, так и кластеров (в вакууме). В данной работе предлагается освоить основы метода квантовой химии, познакомиться с работой программы GAMESS (свободно распространяемая), составить модель и исследовать несколько простых солей с водой.

Дальнейшее развитие работы будет связано с разработкой обобщающей модели солей для метода молекулярной динамики.

7) Курсовая работа **«Разработка и реализация новой функции "Shell Distribution Function" для анализа взаимного расположения молекул в пакете АКМД»**. Связана с математикой, стереометрией и программированием.

Для численного определения взаимного расположения молекул используются функции распределения: радиального (Radial Distribution Function), цилиндрического (Cylindrical Distribution Function), хомячковая (Spiral Staircase Distribution Function) и другие. Они специфичны для разных типов молекул. Предлагается разработать новый тип функции, которая будет показывать число молекул или атомов соседей в сольватной оболочке многоатомной молекулы (молекулы сложной формы). Для решения этой задачи необходимо разработать метод (или найти формулы и алгоритмы) вычисления объёма молекулы, состоящей из пересекающихся сфер. Встроить алгоритм в имеющийся пакет анализа данных моделирования.

8) Курсовая работа **«Разработка параллельных алгоритмов вычисления энергии и сил атом-атомных взаимодействий в методе молекулярной динамики для многопроцессорных ЭВМ на основе многопоточного программирования»**. Связана с параллельным программированием для многопроцессорных ЭВМ.

Параллельные высокопроизводительные вычисления позволяют задействовать все имеющиеся на ЭВМ процессоры (в просторечье – ядра) для решения одной задачи. Чаще всего это приводит к уменьшению времени вычислений. Программа АКМД, разрабатываемая А. В. Комолкиным, в настоящее время использует параллелизм процессов с использованием MPI, что упрощает программу, но делает её менее эффективной с точки зрения получения наивысшего ускорения вычислений на одной ЭВМ (=одном узле). Методика MPI позволяет эффективно использовать программу на нескольких узлах (на компьютерном кластере). В работе предлагается изучить метод параллельного программирования на одном узле с помощью OpenMP или с помощью pthreads, разработать и реализовать алгоритм параллельного вычисления сил внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий в программе АКМД. В идеале – реализовать обе технологии программирования и проверить, какая из них приводит к большему ускорению программы на имеющихся в распоряжении студентов ЭВМ: от 4-процессорной машины на базе Intel Core i3 на рабочем месте до 24-процессорных серверов в Вычислительном центре СПбГУ.