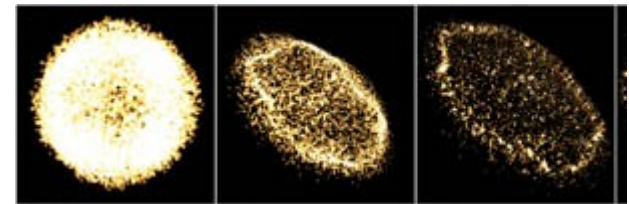
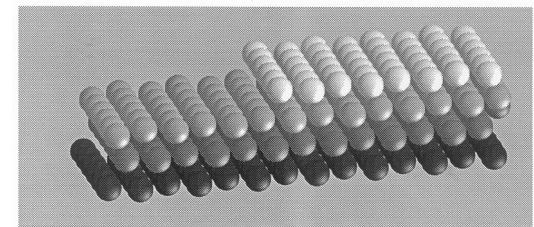


NBCM321 a 322 Základy počítačové fyziky I a II 2/2 KZ

1. Vybrané numerické metody:
řešení soustav algebraických rovnic,
obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic,
rychlá Fourierova transformace atd.,
paralelizace vybraných algoritmů
2. Modelování mnohočásticových systémů:
metoda Monte Carlo, molekulární dynamika (MD),
numerické řešení pohybových rovnic,
termodynamické soubory - kontrola teploty a tlaku,
silová pole, Ewaldova sumace, výpočet volné energie
3. Modelování kvantově-mechanických systémů:
numerické řešení Schrodingerovy rovnice, Hartreeho-Fockova metoda,
Carova-Parrinelliho MD (CPMD), QMMM metody atd.
4. Modelování fluidních systémů

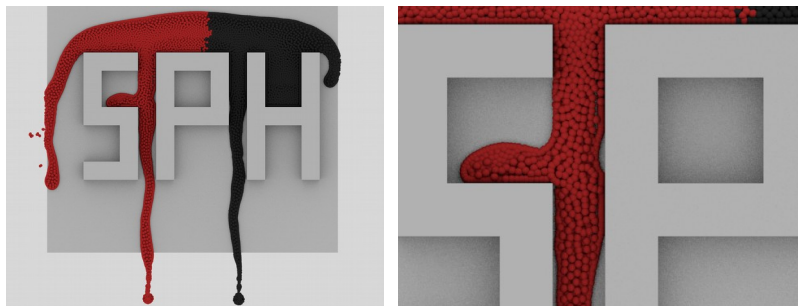


kosmologická N-body simulace

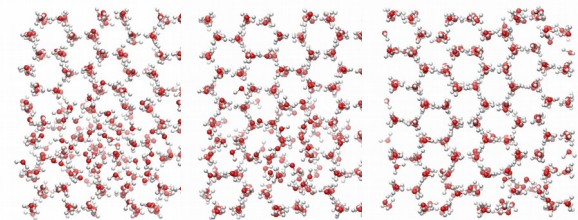


MD

klastr Ar atomů



Smoothed-particle hydrodynamics



proces mrznutí vody



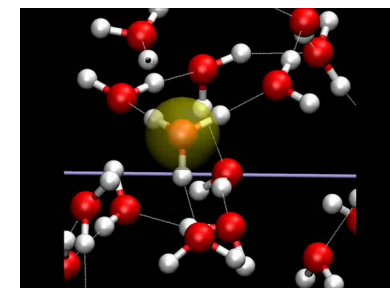
LB

Lattice Boltzmann method



NS

Navier Stokes equations



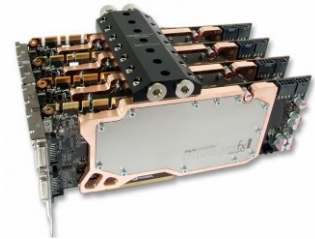
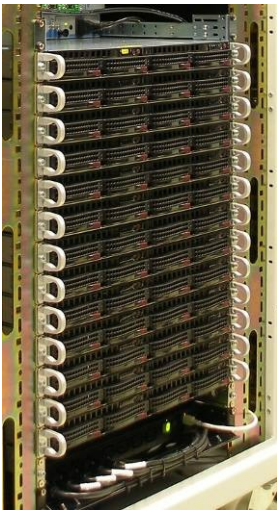
CPMD

transport protonu

Paralelizace výpočtů (ve Fortranu či jazyku C)
na výpočetních uzlech se sdílenou pamětí (**OpenMP**),
počítačových klastrech (**MPI**) či grafických kartách (**CUDA**).

Pro účast v kursu nejsou potřeba žádné předběžné znalosti.

Procvičování probíhá na počítačích superpočítačového MetaCentra.



Molekulárně-dynamické (MD) simulace biomolekul (nukleových kyselin, proteinů a membrán) prostřednictvím softwarových balíčků AMBER, GROMACS a NAMD

Strukturní databáze

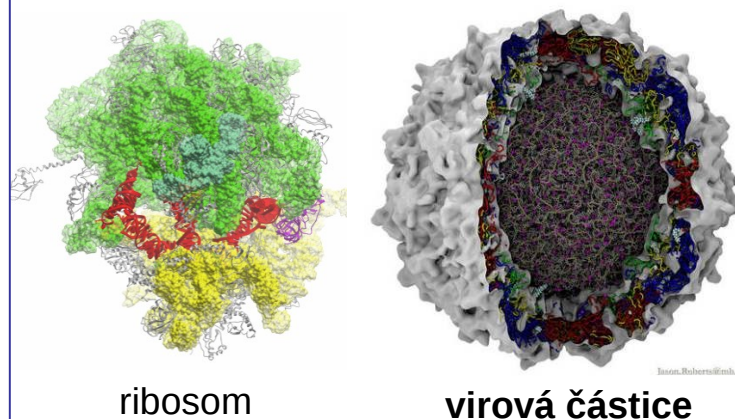
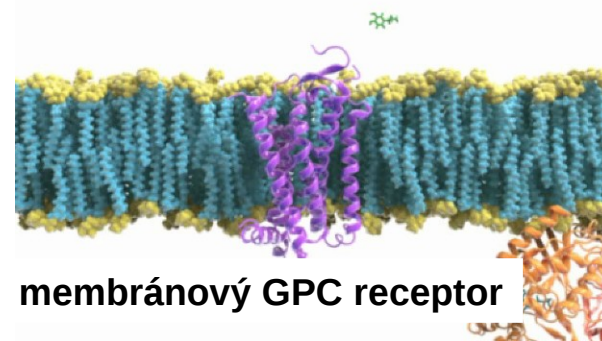
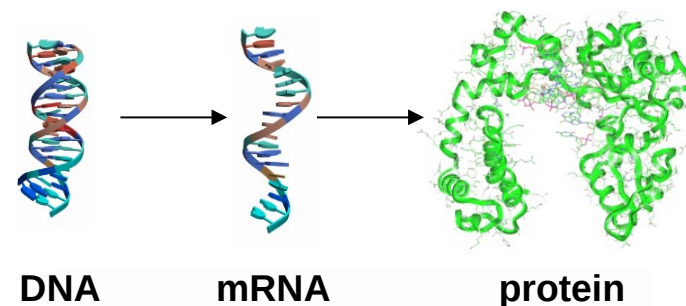
Homologní modelování (MODELLER)

Docking (AutoDock)

In silico optimalizace inhibitoru (AutoGrow)

Výpočet volné energie

Ab initio výpočty
Parametrizace silových polí
(GAUSSIAN, CPMD).



Molekulárně-dynamické simulace umožňují sledovat časový vývoj biomolekulárních systémů, které i s vodní obálkou sestávají z desítek tisíc atomů. Jde o numerické řešení pohybových rovnic:

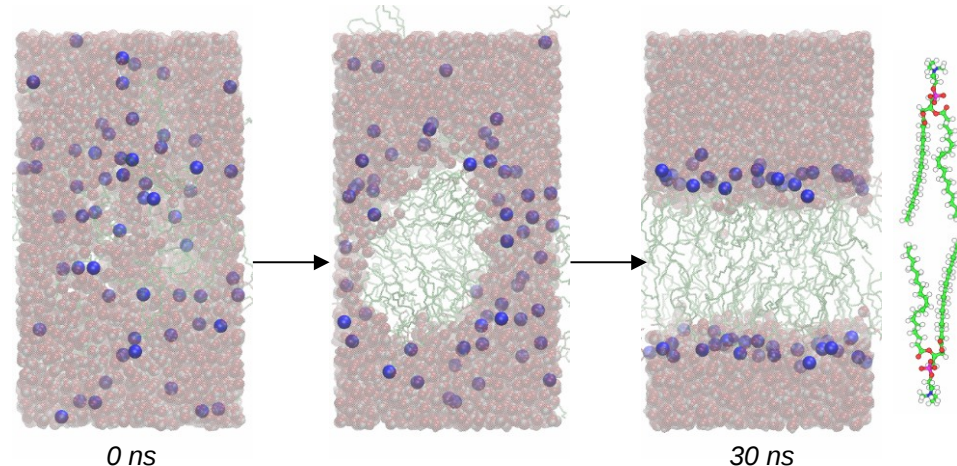
$$\text{rychlost: } v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + h f(q_n),$$

$$\text{poloha: } q_{n+1} = q_n + h v_{n+\frac{1}{2}}.$$

Silové působení mezi atomy biomolekul je popsáno prostřednictvím funkce, jejíž parametry jsou získány na základě kvantově-mechanických výpočtů:

$$E_{\text{pot}} = \sum_b K_b (b - b_0)^2 + \sum_\theta H_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_\phi \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] + \sum \varepsilon \left[\left(\frac{r^*}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r^*}{r} \right)^6 \right] + \sum \frac{q_i q_j}{\varepsilon_{ij} r_{ij}} + \sum \left[\left(\frac{C_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{D_{ij}}{r_{ij}} \right)^{10} \right]$$

Fosfolipidy sestávající z výrazně hydrofobní a hydrofilní části vytvoří v MD simulaci spontánně fosfolipidickou dvojvrstvu.



Bakalářské a diplomové práce

Počítačové modelování komplexů modifikovaných nukleových kyselin a proteinů

Počítačové modelování membránových proteinů

RNDr. Ivan Barvík, PhD - ibarvik@karlov.mff.cuni.cz