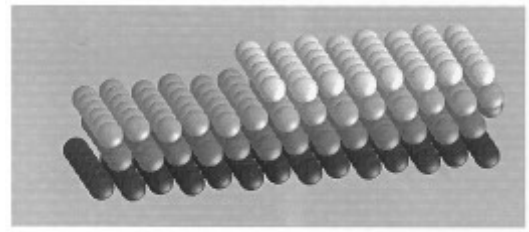


NBCM321 Základy počítačové fyziky I 2/2 KZ

1. Přehled hlavních směrů počítačové fyziky.
2. Vybrané numerické metody:
řešení soustav algebraických rovnic, obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic, rychlá Fourierova transformace atd.
3. Metoda molekulární dynamiky (MD):
numerické řešení pohybových rovnic, silová pole, termodynamické soubory - kontrola teploty a tlaku, periodické okrajové podmínky, dalekodosahové síly, Ewaldova sumace
4. Metoda Monte Carlo
5. Numerické řešení Schrodingerovy rovnice, Hartreeho-Fockova metoda, Carova-Parrinelliho MD (CPMD)
6. Numerické řešení rovnic popisujících proudění tekutin
7. Algoritmy pro fyzikálně korektní fotorealistické vykreslení 3D scény
8. Paralelizace vybraných algoritmů

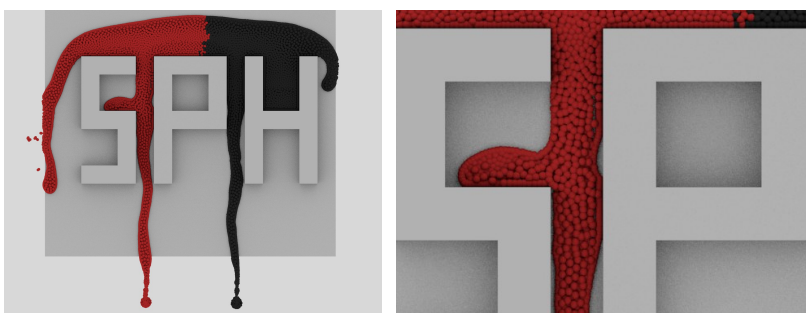


kosmologická N-body simulace

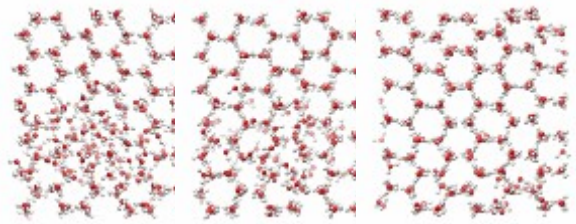


MD

klastr Ar atomů



Smoothed-particle hydrodynamics

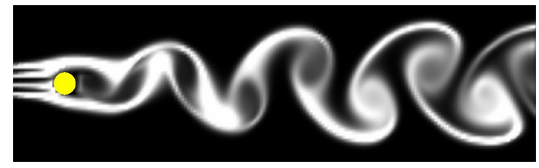


proces mrznutí vody



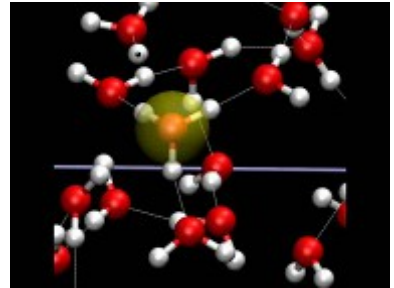
LB

Lattice Boltzmann method



NS

Navier Stokes equations



CPMD

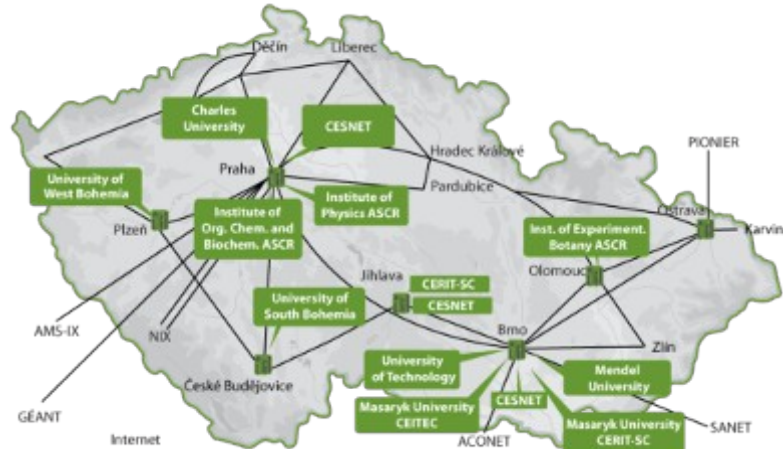
transport protonu

NPRF006 Pokročilé metody programování 1/1 Z

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

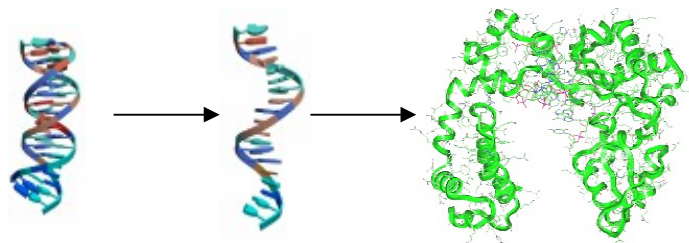
Pro účast v kursu nejsou potřeba žádné předběžné znalosti.

Procvičování probíhá na počítačích superpočítačového MetaCentra.

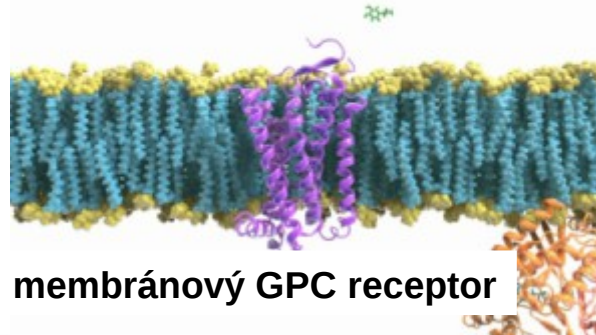


NBCM316 Počítačové modelování biomolekul 1/2 KZ

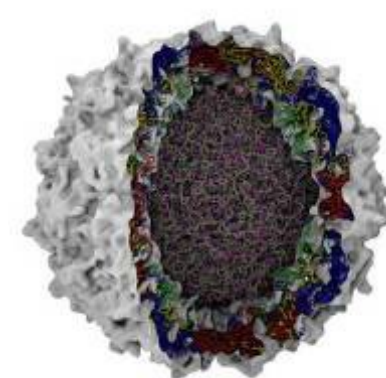
Molekulárně-dynamické simulace biomolekul (nukleových kyselin, proteinů a membrán) prostřednictvím softwarových balíčků AMBER, GROMACS a NAMD. Homologní modelování (MODELLER), ab initio výpočty (GAUSSIAN, CPMD).



DNA mRNA protein



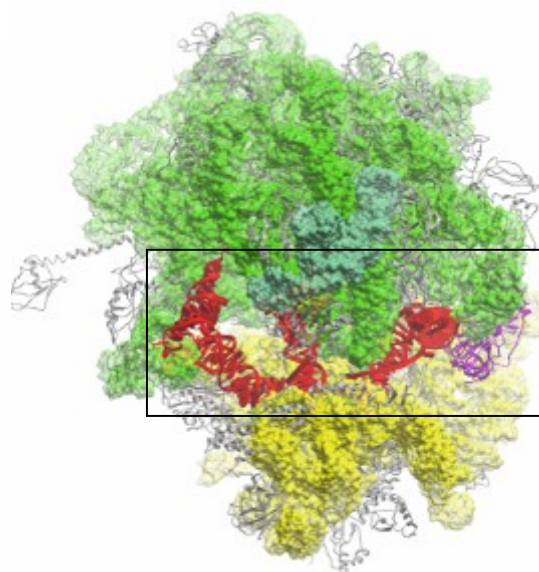
membránový GPC receptor



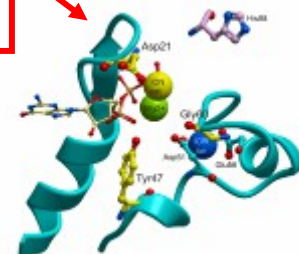
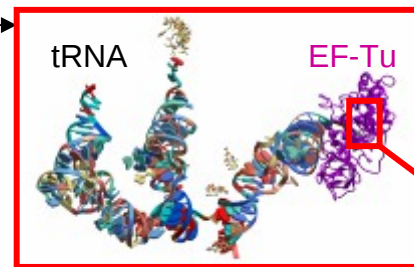
virová částice



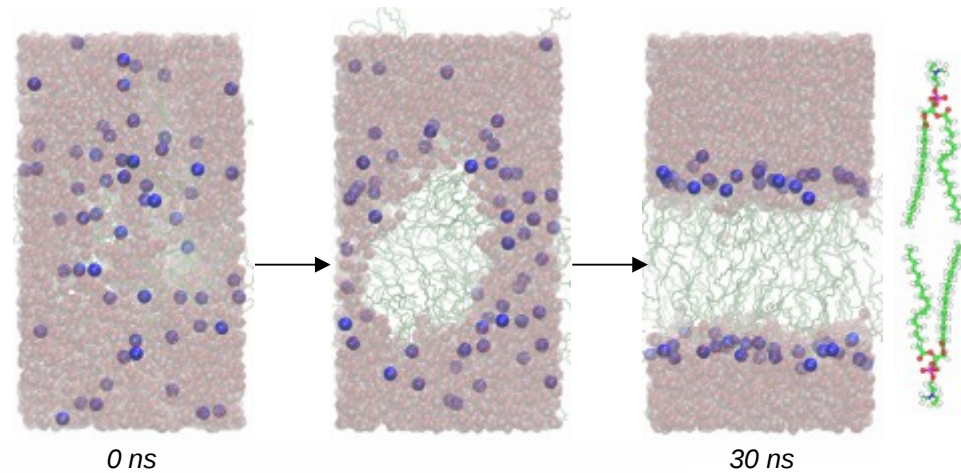
RNA polymeráza
transkripce DNA → mRNA



Ribosom
translace mRNA → protein
3x rRNA, 3x tRNA, mRNA
~50 proteinů



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



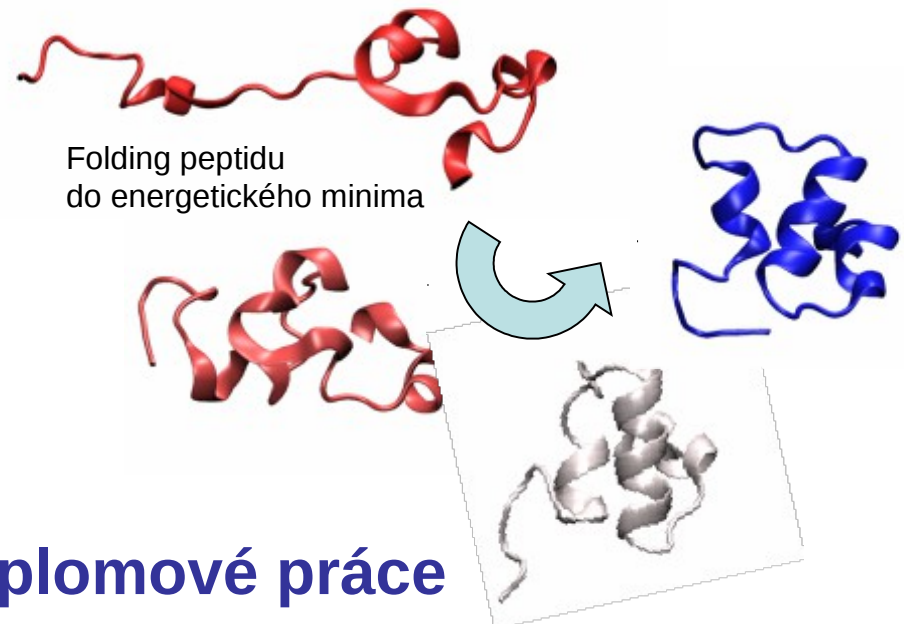
Molekulárně-dynamické simulace umožňují sledovat časový vývoj biomolekulárních systémů, které i s vodní obálkou sestávají z desítek tisíc atomů. Jde o numerické řešení pohybových rovnic:

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

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

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

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



Bakalářské a diplomové práce

Molekulárně-dynamické simulace biomolekul

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