

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

А.Л.Толстик
(подпись) (И.О.Фамилия)

12.12.2016
(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 3314 /уч.

МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:

1-31 03 07 Прикладная информатика (по направлениям)

Направление специальности:

1-31 03 07-02 Прикладная информатика (информационные технологии телекоммуникационных систем)

2016 г.

Учебная программа составлена на основе образовательного стандарта высшего образования по специальности 1-31 03 07 Прикладная информатика ОСВО 1-31 03 07-2013 и учебных планов УВО № G31-170/уч. от 30.05.2013 г. и УВО №G31и-186/уч. от 30.05.2013 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

А. В. Дигрис, старший преподаватель кафедры системного анализа и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета

В. М. Лутковский, старший преподаватель кафедры системного анализа и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой системного анализа и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета
(протокол № 12 от 14 июня 2016 г.);

Учебно-методической комиссией факультета радиофизики и компьютерных технологий Белорусского государственного университета
(протокол № 3 от 22 ноября 2016 г.).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Учебная программа дисциплины специализации «Моделирование биофизических систем» разработана для студентов специальности 1-31 03 07 Прикладная информатика (по направлениям), направление специальности 1-31 03 07-02 Прикладная информатика (информационные технологии телекоммуникационных систем) в соответствии с требованиями Образовательного стандарта ОСВО 1-31 03 07-2013 и учебного плана по специальности 1-31 03 07.

Цель преподавания дисциплины – дать студентам теоретические знания и практические навыки, необходимые для формирования специалиста в области стохастического моделирования биофизических систем.

Задачи дисциплины состоят в формировании у студентов современных знаний по методам, предназначенным для построения алгоритмов моделирования случайных величин и стационарных случайных процессов, параметрическому способу описания и принципам построения алгоритмов моделирования случайных потоков, а также использованию данных алгоритмов для построения имитационных моделей биофизических систем. Кроме того, в задачи дисциплины входит формирование у студентов навыков решения практических задач в изучаемой области.

Учебная программа составлена с учетом межпредметных связей и программ по дисциплинам «Математический анализ», «Теория вероятностей и математическая статистика», «Математическое моделирование», «Программирование».

Изучение учебной дисциплины «Моделирование биофизических систем» должно обеспечить формирование у студента следующих компетенций:

АК-1. Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.

АК-2. Владеть системным и сравнительным анализом.

АК-6. Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.

АК-7. Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.

ПК-1. Проектировать, разрабатывать и тестировать программное обеспечение различных видов.

ПК-7. Применять профессиональные знания и навыки для проведения научных исследований в области прикладной информатики.

ПК-8. Разрабатывать и совершенствовать методы исследований в области информационных и телекоммуникационных систем.

ПК-9. Работать с научно-технической информацией с использованием современных информационных технологий.

ПК-10. Формулировать выводы и рекомендации по применению результатов научно-исследовательской работы.

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать:

- методы построения генераторов случайных величин;
- методы построения генераторов стационарных случайных процессов;
- параметрический способ описания и принципы построения алгоритмов – моделирования случайных потоков;
- численные алгоритмы метода молекулярной динамики;

уметь:

- строить и реализовывать программно алгоритмы моделирования случайных величин, процессов и потоков событий;
- определять характеристики различных молекулярных систем с помощью методов моделирования;
- творчески и эффективно использовать полученные знания в профессиональной деятельности.
- моделировать динамические системы и типовые нейронные сети;

владеть:

- методами моделирования случайных величин, процессов и потоков событий с целью их использования для построения моделей биофизических систем;
- навыками практического применения программных средств моделирования динамических систем.

Программа изучаемой дисциплины рассчитана на 116 часов, из них – 62 часов аудиторных. Распределение аудиторных часов по видам занятий: лекций - 34 часа, лабораторных работ – 28 часа.

Дисциплина «Моделирование биофизических систем» изучается студентами дневной формы получения высшего образования на 4-м курсе в 8-ом семестре.

Текущая аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Построение генераторов случайных величин.

1.1. Генераторы непрерывной случайной величины, равномерно распределенной на отрезке $[0,1]$ и критерии проверки качества их работы. Теоретическое описание непрерывной случайной величины с равномерным распределением на отрезке $[0,1]$ и способы ее моделирования. Арифметические генераторы и общие требования к их разработке. Конгруэнтные генераторы и их виды. Линейный конгруэнтный генератор (ЛКГ). Смешанные и мультипликативные ЛКГ. ЛКГ с простым модулем. Критерии проверки качества генераторов. Критерий согласия «хи-квадрат». Критерий серий. Критерий восходящих серий. Критерий Колмогорова-Смирнова.

1.2. Общие методы построения генераторов непрерывных случайных величин. Метод обратных функций. Метод суперпозиции. Метод интегральной суперпозиции. Метод кусочной аппроксимации. Метод Неймана.

1.3. Построение специальных генераторов непрерывных случайных величин. Специальный метод моделирования распределения Эрланга. Порядок моделирования нормальных случайных величин. Генератор нормальной случайной величины на основе перехода в полярную систему координат. Генератор нормальной случайной величины на основе центральной предельной теоремы теории вероятностей. Обобщенный подход к моделированию случайных векторов.

Раздел 2. Построение генераторов стационарных случайных процессов.

2.1. Метод скользящего суммирования. Теоретическое описание случайных процессов и использованием функций распределения и моментных функций. Задача моделирования стационарных случайных процессов. Метод скользящего суммирования и способы определения коэффициентов в его базовом выражении.

2.2. Метод рекуррентных разностных уравнений. Метод рекуррентных разностных уравнений и условия его использования. Нахождение коэффициентов в базовом выражении метода рекуррентных разностных уравнений путем факторизации спектральной плотности. Общий подход к построению генераторов негауссовских случайных процессов.

Раздел 3. Параметрический способ описания потоков случайных событий и алгоритмы их моделирования.

3.1. Параметрический способ описания и обобщенные подходы к моделированию случайных потоков. Понятие случайного потока. Два способа параметрического описания случайных потоков. Обобщенные подходы к построению алгоритмов моделирования случайных потоков. Производящий функционал (ПФЛ) случайного потока. Свойства ПФЛ. Понятие функциональной производной от ПФЛ по пробной функции. Использование ПФЛ для

нахождения совместных плотностей распределения и основных статистических характеристик случайного потока.

3.2. Теоретическое описание и алгоритмы моделирования типовых случайных потоков. Одноточечный поток и его теоретическое описание с использованием теории ПФЛ. Поток Бернулли. ПФЛ потока Бернулли. Нахождение совместных плотностей распределения и основных статистических характеристик потока Бернулли. Общий подход к моделированию потока Бернулли. Однородный поток Бернулли и специальные алгоритмы его моделирования. Поток Пуассона и его теоретическое описание с использованием теории ПФЛ. Алгоритмы моделирования потока Пуассона.

3.3. Алгоритмы моделирования дважды стохастических потоков. Отрицательно-биномиальный поток и его теоретическое описание с использованием теории ПФЛ. Алгоритмы моделирования отрицательно-биномиального потока. Поток Кокса. ПФЛ потока Кокса. Основные статистические характеристики потока Кокса. Обобщенный алгоритм моделирования потока Кокса. Парно-коррелированный поток и его теоретическое описание с использованием теории ПФЛ. Специальный алгоритм моделирования парно-коррелированного потока.

3.4. Имитационная модель эксперимента во флуоресцентной флукуационной спектроскопии. Принципы проведения измерений во флуоресцентной флукуационной спектроскопии (ФФС). Имитационная модель эксперимента в ФФС. Параметры имитационной модели и их физический смысл. Задание области моделирования и граничных условий. Моделирование местоположения молекул образца и их диффузии. Моделирование переходов между излучательным и безизлучательным состояниями молекул. Моделирование потока фотонов флуоресценции. Особенности использования имитационной модели при моделировании образца, содержащего молекулы различного типа.

Раздел 4. Сложные динамические системы

4.1. Формы представления моделей динамических систем. Определение динамической системы и элементы ее описания. Описание динамической системы дифференциальными уравнениями. Представление модели линейной динамической системы в пространстве состояний и в виде передаточной функции. Понятия наблюдаемости и управляемости динамической системы. Применение различных форм представления моделей динамических систем при компьютерном моделировании.

4.2. Метод молекулярной динамики. Границы применимости метода. Потенциалы взаимодействия частиц. Граничные условия. Алгоритмы численного интегрирования уравнений движения. Пути ускорения вычислений. Тестовые задачи и оценка точности моделирования. Примеры программной реализации и применения метода молекулярной динамики.

4.3. Модели энергетического обмена в биофизических системах. Физические механизмы энергетического обмена. Аналитическая и имитационная модели передачи энергии между донором и акцептором. Расстояние Фёр-

стера. Передача энергии в системе с несколькими флуорофорами. Алгоритм и его программная реализация. Моделирование временных и спектральных характеристик флуоресценции. Верификация модели.

4.4. Процессы в нелинейных динамических системах. Процессы в нелинейной динамической системе. Одномерные отображения. Система Лоренца. Странные аттракторы. Перемежаемость. Временные ряды, порождаемые динамическими системами. Теорема Такенса. Моделирование и предсказание динамики биологических популяций.

Раздел 5. Стохастические нейронные сети

5.1. Модели нейрона и нейронной сети. Биологический нейрон. Формальный нейрон Маккалока-Питтса. Функции активации нейрона. Основные виды нейронных сетей и методы их обучения. Спайковые нейронные сети. Персептрон. Сеть Хопфилда и ее применение. Способы анализа динамики нейронного ансамбля.

5.2. Машина Больцмана и стохастическое обучение. Архитектуры полной и ограниченной машины Больцмана. Функция распределения вероятности состояний нейрона. Минимизация энергии нейронного ансамбля. Алгоритмы стохастического обучения. Метод имитации отжига. Обучение с использованием генетических алгоритмов.

5.3. Глубокие нейронные сети и их обучение. Моделирование зрительной системы. Когнитрон. Возбуждающие и тормозящие нейроны. Области связи нейронов. Структура сверточной нейронной сети Лекуна. Функции сверточных и субдискретизирующих слоев. Преимущества сверточной сети в сравнении с персептроном.

5.4. Моделирование и применение нейронных сетей. Программные и аппаратные реализации моделей нейронных сетей. Принципы подготовки данных для обучения и тестирования. Алгоритм обучения машины на опорных векторах. Линейно разделимые и линейно неразделимые пространства признаков. Размерность Вапника-Чевоненкиса. Примеры анализа изображений биомедицинских объектов с использованием нейронных сетей.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов		Количество часов УСР	Формы контроля знаний
		Лекции	Лабораторные занятия		
1.	Построение генераторов случайных величин (6 ч)				
1.1.	Генераторы непрерывной случайной величины, равномерно распределенной на отрезке $[0,1]$ и критерии проверки качества их работы.	2			Выборочный опрос
1.2.	Общие методы построения генераторов непрерывных случайных величин.	2			Выборочный опрос
1.3.	Построение специальных генераторов непрерывных случайных величин.	2			Выборочный опрос
2.	Построение генераторов стационарных случайных процессов (4 ч):				
2.1.	Метод скользящего суммирования.	2			Выборочный опрос
2.2.	Метод рекуррентных разностных уравнений.	2			Выборочный опрос
3.	Параметрический способ описания потоков случайных событий и алгоритмы их моделирования (8 ч)				
3.1.	Параметрический способ описания и обобщенные подходы к моделированию случайных потоков.	2			Выборочный опрос
3.2.	Теоретическое описание и алгоритмы моделирования ти-	2	6		Отчет по лаборатор-

	повых случайных потоков.				ной работе
3.3.	Алгоритмы моделирования дважды стохастических потоков.	2	10		Отчет по лабораторной работе
3.4.	Имитационная модель эксперимента во флуоресцентной флуоресцентной спектроскопии.	2			Выборочный опрос
4	Сложные динамические системы				
4.1	Формы представления моделей динамических систем.	2			Выборочный опрос
4.2	Метод молекулярной динамики.	2	8		Отчет по лабораторной работе
4.3	Модели энергетического обмена в биофизических системах.	2			Выборочный опрос
4.4	Процессы в нелинейных динамических системах.	2			Выборочный опрос
5	Стохастические нейронные сети				
5.1	Модели нейрона и нейронной сети.	2			Выборочный опрос
5.2	Машина Больцмана и стохастическое обучение.	2			Выборочный опрос
5.3	Глубокие нейронные сети и их обучение.	2			Выборочный опрос
5.4	Моделирование и применение нейронных сетей.	2	4		Отчет по лабораторной работе
Итого:		34	28		

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. *Апанасович, В. В.* Статистический анализ потоков в физическом эксперименте / В. В. Апанасович, А. А. Коляда, А. Ф. Чернявский. – Минск: Университетское, 1988. – 256 с.
2. *Апанасович, В. В.* Цифровое моделирование стохастических систем / В.В. Апанасович, О. М. Тихоненко. – Минск: Университетское, 1986. – 127 с.
3. *Бусленко, В. В.* Моделирование сложных систем / В. В. Бусленко. – М.: Наука, 1978. – 400 с.
4. *Быков, В. В.* Цифровое моделирование в статистической радиотехнике / В. В. Быков. – М.: Советское радио, 1971. – 328 с.
5. *Лоу, А. М.* Имитационное моделирование / А. М. Лоу, В. Д. Кельтон. – 3-е изд. – СПб.: Питер, 2004. – 848 с.
6. *Дигрис, А. В.* Дискретно-событийное моделирование: курс лекций. / А.В. Дигрис. – Мн.: БГУ, 2011. – 174 с.
7. Simulation of Autocorrelation Function and Photon Counting Distribution in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy / I. P. Shingaryov, V.V. Skakun, and V.V. Apanasovich // In book Fluorescence Spectroscopy and Microscopy: Methods and Protocols: Methods in Molecular Biology, Springer Protocols, Yves Engelborghs and Antonie J.W.G. Visser (eds.). Springer Science+Business Media, LLC. vol. 1076. – 2014. P. 743-255.
8. Гулд, Х., Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. /Х. Гулд, Я.Тобочник. Пер с англ. М.: Мир, 1990.
9. Лутковский, В.М. Нейронные сети. Конспект лекций. М. БГУ. 2003. 99 с.

Дополнительная литература

1. *Большаков, И. А.* Прикладная теория случайных потоков / И. А. Большаков, В. С. Ракошиц. – М.: “Советское радио”, 1978. – 248 с.
2. *Шалыгин А. С.* Прикладные методы статистического моделирования / А. С. Шалыгин, Ю. И. Палагин. – “Машиностроение”, 1986. – 320 с.
3. Кузнецов С.П. Динамический хаос. М.: Физматлит, 2001. – 296 с.
4. LeCun, Y. Backpropagation Applied to Handwritten ZIP Code Recognition. Neural Computation. 1990. Vol. 4. No 1. P. 541 – 551.

Примерный перечень лабораторных работ

1. Моделирование потока Пуассона (6 часов).
2. Моделирование потока Кокса (10 часов).
3. Моделирование систем методом молекулярной динамики (8 часов).
4. Моделирование и применение нейронных сетей (4 часа).

Методические рекомендации по организации управляемой самостоятельной работы студентов

Для организации управляемой самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине рекомендуется использовать современные информационные технологии: размещение в сетевом доступе комплекса учебных и учебно-методических материалов (программа курса, электронный вариант учебного пособия, методические указания, задания и информационные ресурсы для выполнения лабораторных работ, список рекомендуемой литературы и др.).

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

В качестве формы итогового контроля по дисциплине используется зачет.

С целью текущего контроля знаний и умений студентов по дисциплине «Моделирование биофизических систем» используются следующие диагностические средства:

- выборочный опрос при выполнении лабораторных работ;
- защита индивидуальных заданий при выполнении лабораторных работ;
- отчеты по лабораторным работам;
- итоговое компьютерное тестирование.

Методика формирования итоговой оценки

Итоговая оценка выставляется в соответствии с правилами проведения аттестации постановления №53 от 29 мая 2012 г., положения о рейтинговой системе БГУ (ред. 2015 г.), критериями оценки студентов (10 баллов).

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола) ¹
Государственный эк-замен	Кафедра системного анализа и компьютерного моделирования	нет	Изменений не требуется. Протокол № 12 от 14.06.2016 г.

¹ При наличии предложений об изменениях в содержании учебной программы УВО.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО
на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 20 ____ г.)
(название кафедры)

Заведующий кафедрой

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

(И.О.Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

(И.О.Фамилия)