

Белорусский государственный университет
Механико-математический факультет
Кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа

Аннотация к магистерской диссертации
«Моделирование молекулярных комплексов»

Мытько Андрей Леонидович

руководитель Малевич Александр Эрнестович

2016

Магистерская диссертация содержит 45 страниц, 6 рисунков, 6 таблиц, 2 приложения, 21 источник.

Ключевые слова: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ, GROMACS, ТРАЕКТОРИЯ, PYTHON.

Магистерская диссертация представляет собой описание и методы работы с программным обеспечением, позволяющим осуществлять моделирование молекулярной динамики, и решение задачи из этой области – моделирование молекулярных комплексов.

Целью магистерской диссертации является создание теоретической базы и программного инструментария на языке Python для решения прикладных задач из области молекулярной физики на примере проблемы молекулярных комплексов.

Для достижения поставленной цели использовались

- пакет химического моделирования GROMACS,
- специализированные модули MDTraj, NetworkX, Numba,
- представление вещества в виде графа,
- параллельные вычисления на CPU.

В магистерской диссертации представлены следующие результаты:

- 1) описаны методы установки и настройки программного обеспечения для моделирования молекулярной динамики,
- 2) разработан программный интерфейс для решения задачи молекулярных комплексов,
- 3) написаны отдельные программы, решающие частные случаи проблемы.

Магистерская работа выполнена автором самостоятельно.

The thesis is presented in the form of an explanatory note of 45 pages, 6 figures, 6 tables, 2 appendices, 21 references.

Keywords: MOLECULAR DYNAMICS, MOLECULAR CLUSTERS, GROMACS, TRAJECTORY, PYTHON.

Master's thesis contains a description and methods of work with the software, carrying out simulations of molecular dynamics, and the process of solution of the specific problem in this area – the modeling of molecular clusters.

The purpose of the master's thesis is to provide a theoretical basis and software tools in Python for applications in the field of molecular physics as an example of the problem of molecular clusters.

To achieve the goal have been used

- chemical modeling package GROMACS,
- specialized modules MDTraj, NetworkX, Numba,
- presentation of the material in graph form,
- parallel computing on the CPU.

The following results are presented in the master's thesis:

- 1) methods of software installation and configuration for the simulation of molecular dynamics are described,
- 2) the programming interface is designed for solving the problem of molecular clusters,
- 3) some programs solving particular cases of the problem are written.

The master's thesis was written solely by the author.