

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Университет «Дубна»

Институт системного анализа и управления

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой

_____/Кореньков В.В./
(Подпись) (Ф И О)

« ____ » _____ 20__ г.

З а д а н и е

на выпускную квалификационную работу – бакалаврскую работу

Тема Разработка и оптимизация оценочной функции для учета межмолекулярных взаимодействий в белковых комплексах.

Утверждена приказом № _____ от _____

ФИО студента Никулин Даниил Андреевич

Группа 4181 **Направление подготовки** 01.03.02 Прикладная математика и информатика

Направленность (профиль) образовательной программы Математическое моделирование

Выпускающая кафедра распределенных информационно-вычислительных систем

Дата выдачи задания « ____ » _____ 20__ г.

**Дата завершения
выпускной квалификационной работы** « ____ » _____ 20__ г.

г. Дубна

Исходные данные к работе

В рамках практики на третьем курсе совместно с научным руководителем разработана библиотека на языке программирования C++ для полноатомного моделирования белка и выполнения структурных изменений в белковых комплексах. В настоящей работе библиотека будет дополнена оценочной функцией. В работе будет произведена реализация и оптимизация оценочной функции для выполнения численной оценки энергии взаимодействия.

Объект и предмет исследования. Математическая и физическая модель образования устойчивого комплекса белок-пептид является предметом исследования. Объектом исследования является комплекс вида белок-белок.

Целями данной работы являются следующие задачи:

1. Разработка оценочной функции для оценки энергии взаимодействия компонентов в комплексах вида белок-белок.
2. Оптимизация вычислительной сложности разработанной оценочной функции с использованием структуры данных k-d-дерево.
3. Сравнение результатов работы разработанной оценочной функции с существующими оценочными функциями.

Результаты работы:

1. Содержание пояснительной записки (перечень рассматриваемых вопросов)

Выполнена реализация и оптимизация оценочной функции на языке программирования C++. Для тестового набора комплексов приведены результаты численных экспериментов, демонстрирующие оценки энергии взаимодействия, полученные с помощью разработанной функции.

2. Перечень демонстрационных листов

Презентация PowerPoint

Руководитель работы

_____ /ст. преп. Полуян С. В./

Задание принял к исполнению

(дата)

(подпись студента)

Я, Никулин Даниил Андреевич, ознакомлен(а) с требованием об обязательности проверки выпускной квалификационной работы на объем заимствования. Все прямые заимствования из печатных и электронных источников, а также из защищенных ранее выпускных квалификационных работ, научных докладов об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации), кандидатских и докторских диссертаций, должны иметь в работе соответствующие ссылки.

Я ознакомлен(а) с Порядком проверки на объем заимствования и размещения в электронно-библиотечной системе текстов выпускных квалификационных работ и научных докладов обучающихся, согласно которому обнаружение в выпускной квалификационной работе заимствований, в том числе содержательных, неправомерных заимствований является основанием для недопуска к защите выпускной квалификационной работы и отчисления из образовательной организации.

_____/ Никулин Д. А. /
подпись Фамилия И.О.