

## MUHANDISLIK VA KOMPYUTER GRAFIKASI

1. Molekulyar dinamika (MD) nima?
2. Molekulyar dinamikani modellashtirish qanday asosiy bosqichlarni o'z ichiga oladi?
3. Molekulyar dinamikada atomlarning harakatini tasvirlash uchun qanday tenglamalar qo'llaniladi?
4. Klassik molekulyar dinamika va kvant dinamikasi o'rtasidagi farq nima?
5. Molekulyar dinamikada qanday kuch maydonlari qo'llaniladi?
6. Harakat tenglamalarini birlashtirish uchun qanday raqamli usullar qo'llaniladi (masalan, Verle usuli)?
7. Davriy chegara shartlari nima va ular nima uchun MD-da qo'llaniladi?
8. NVT va NPT ansambllarni farqlari nimada va qanday holatda foydalanish afzal?
9. Molekulyar dinamikada haroratni nazorat qilishning qanday usullari qo'llaniladi?
10. Lennard-Jons potentsiali va u nima uchun ishlatiladi?
11. Molekulyar dinamika fanning qaysi sohalarida qo'llaniladi?
12. Molekulyar dinamika suyuqlik va gazlarning xususiyatlarini o'rganishga qanday yordam beradi?
13. Biokimyoda molekulyar dinamikaning qo'llanilishini tasvirlab bering (masalan, oqsillarni o'rganish uchun).
14. MD modellashtirish materiallarni tadqiq qilish uchun qanday ishlatiladi? Materialshunoslik bilan bog'lab tavsiflab bering.
15. Molekulyar dinamika yordamida qanday parametrlarni o'rganish mumkin?
16. Molekulyar dinamikani ishga tushirish uchun qanday dastlabki parametrlarni o'rnatish kerak?
17. Nima uchun to'g'ri integratsiya bosqichini tanlash muhim?
18. O'zaro ta'sirni kesish (cut-off) radiusi nima va u natijalarga qanday ta'sir qiladi?
19. Potensial kuch maydoni modelini tanlash simulyatsiya natijalariga qanday ta'sir qiladi?

20. Molekulyar dinamikaning asosi qanday taxminlar?
21. MD uchun qanday dasturlar va paketlarni bilasiz? Sharhlab bering.
22. MD hisob-kitoblarini amalga oshirish uchun qanday resurslar eng muhim?
23. Molekulyar dinamikani amalga oshirishda eng ko'p uchraydigan xato turlari qanday?
24. Energiyani minimallashtirish nima va u modellashtirishni boshlashdan oldin nima uchun amalga oshiriladi?
25. MD davomida olingan traektoriya ma'lumotlarini qanday izohlash mumkin?
26. Oqsil Strukturaviy xususiyatlarni qanday tahlil qilish mumkin?
27. Simulyatsiya davomida ishlatiladigan qanday box(yacheyka) turlarini bilasiz va ularni tanlashda nimalarga e'tibor berish kerak?
28. Index fayl qanday hosil qilinadi va anima uchun zarur?
29. MD modellashtirish natijalarining eksperimental natijalar bilan qanday solishtirish mumkin?
30. Bog'langan potensialning asosiy turlari va ular molekulyar dinamika hisoblashlarida qanday rol o'ynaydi?
31. Bog'lanmagan potenciallar nima va ular molekulyar dinamika modellarida qaysi o'zaro ta'sirlarni tavsiflaydi?
32. Elektr maydonni molekulyar dinamika simulyatsiyalarida qo'llashdan maqsad nima va uning qanday tadbqiq sohalari mavjud?
33. Molekulyar dinamika simulyatsiyasida elektr maydon ta'sirida molekulalarning harakati qanday o'zgaradi va bu o'zgarishlarni qanday tahlil qilish mumkin?
34. Qanday qilib elektr maydonni to'g'ri parametrlashtirish va u orqali biologik molekulalar yoki materiallarning xatti-harakatini o'rganish mumkin?
35. Molekulyar dinamikada qanday turdagi elektr maydon qo'llash mumkin va uning chegaralari?
36. mdp faylida temperaturani boshqarish uchun qanday algoritmlar ishlatiladi va ularni qanday holatlarda tanlash kerak?

37. ref\_t parametri mdp faylida nima uchun ishlatiladi va har bir komponent uchun bir xil yoki turli temperaturani belgilash mumkinmi?
38. Temperatura va bosim mdp faylda qanday birliklarda yoziladi?
39. GROMACS bazasida mavjud bo'lmagan molekula uchun kuch maydonlarini qanday yaratish mumkin va qaysi vositalar yoki dasturlardan foydalaniladi?
40. Molekula parametrlarini verifikatsiya qilish va optimallashtirish uchun qanday usullar qo'llaniladi va ular qanday aniqlikni ta'minlaydi?