

# НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики конденсовани систем НАН України

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Гарант освітньої програми

«Фізика та астрономія»

Т.М. Брик

“ “ 2017.

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### **ВБ2.7. “Комп’ютерне моделювання біофізичних та біохімічних процесів”**

ІІІ рівень вищої освіти – освітньо-науковий

галузь знань	<u>10 Природничі науки</u>
спеціальність	<u>104 Фізика та астрономія</u>
спеціалізація	01.04.02 теоретична фізика, 01.04.07. фізика твердого тіла, 01.04.24 фізика колоїдних систем
вид дисципліни	<u>вільного вибору / обов’язкова</u>
мова викладання	<u>українська</u>

Львів – 2016 рік

Робоча програма з навчальної дисципліни «*Комп'ютерне моделювання біофізичних та біохімічних систем*» для здобувачів III освітньо-наукового рівня підготовки

**Розробник:**

Старший науковий співробітник відділу КМБС,  
кандидат фізико-математичних наук

А. Баумкетнер

Робоча програма розглянута та схвалена на засіданні Вченої ради ІФКС  
НАН України

Протокол від «1» червня 2017 року № 3

Вчений секретар ІФКС НАН України  
кандидат фізико-математичних наук

Р.С. Мельник

## 1. Структура навчальної дисципліни

Найменування показників	Всього годин
	Денна форма
Кількість кредитів/год.	3/90
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	48
• лекційні заняття, год.	16
• семінарські заняття, год.	16
• практичні заняття, год.	16
• лабораторні заняття, год.	-
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	42
• контрольні роботи, к-сть/год.	-
• розрахункові (розрахунково-графічні), к-сть/год.	-
• індивідуальне науково-дослідне завдання, к-сть/год.	18
• підготовка до навчальних занять та контрольних заходів, год.	24
Екзамени	1
Заліки	-

Частка аудиторного навчального часу студента у відсотковому вимірі – 53.3%

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

**2.1. Мета вивчення навчальної дисципліни** – вивчити основи комп'ютерного моделювання біофізичних та біохімічних систем. Ознайомитися з основними методами комп'ютерних досліджень біологічних молекул таких як білки та нуклеїнові кислоти. Опанувати основні концепції цих методів, включаючи атомні силові поля, моделі сольватації, методи розрахунку вільної енергії. Отримати практичні навички з застосування сучасних розрахункових пакетів до біофізичних та біохімічних задач, що необхідні для успішних досліджень в багатьох нових напрямках сучасної науки, таких як нано- та біотехнології.

## **2.2. Завдання навчальної дисципліни**

Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі **результати навчання** :

1. Знати сучасні математичні моделі для опису білків та нуклеїнових кислот
2. Знати основні силові поля для опису біологічних молекул
3. Знати основні моделі сольватації
4. Знати методи симуляцій в розширених ансамблях
5. Знати методи розрахунку вільної енергії
6. Вміти провести елементарні комп'ютерні розрахунки для білків та нуклеїнових кислот

Вивчення навчальної дисципліни передбачає формування у докторантів необхідних компетентностей:

### ***Загальні компетентності:***

- 1) глибинні знання сучасних підходів до комп'ютерного моделювання біофізичних та біохімічних систем;
- 2) критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей в галузі біофізики та біохімії;
- 3) уміння ефективно спілкуватися з широкою науковою спільнотою комп'ютерного моделювання білків та нуклеїнових кислот;
- 4) уміння практичного застосування сучасних розрахункових пакетів;
- 5) ініціювання оригінальних дослідницько-інноваційних задач для дослідження процесів за участі білків та нуклеїнових кислот.

### ***Фахові компетентності:***

- 1) опанування основ комп'ютерного моделювання біологічних молекул
- 2) знання основних тенденцій та важливих результатів в методології комп'ютерних досліджень білків та нуклеїнових кислот
- 3) вміння ефективно застосовувати теоретичні методи, математичне моделювання, виконувати обчислювальні експерименти при проведенні наукових досліджень в галузі біофізики та біохімії;
- 4) вміння самостійно формулювати задачу та доводити дослідження до логічного завершення;
- 5) здатність аргументувати вибір методу розв'язування спеціалізованої задачі, критично оцінювати отримані результати та захищати висновки
- 6) здатність інтегрувати знання з інших дисциплін, застосовувати системний підхід та враховувати обчислювальні аспекти при розв'язанні прикладних задач;

Результати навчання даної дисципліни деталізують такі **програмні результати навчання** :

**Знання (ЗН) :**

- 1) здатність продемонструвати систематичні знання сучасних методів проведення фундаментальних досліджень в області біофізики та біохімії;
- 2) здатність застосовувати отримані знання та вміння до проблем в прикладних галузях нано- та біо-технологій;

**Уміння (УМ):**

- 1) здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію в галузі біофізики та біохімії з різних джерел;
- 2) застосовувати знання і розуміння для розв'язування задач аналізу структури білків та нуклеїнових кислот;
- 3) вміння побудувати математичну модель для спеціалізованого білка чи нуклеїнової кислоти
- 4) вміння обґрунтовано вибрати модель, силове поле та метод сольватації
- 5) вміння проаналізувати результатів отриманих в комп'ютерному моделюванні
- 6) здатність критично сформулювати висновки
- 7) здатність проаналізувати обмеження отриманих висновків/результатів
- 8) вміння планувати наступні кроки в самостійних дослідженнях
- 9) вміння ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди;

**Комунікація(КОМ):**

- 1) уміння ефективно спілкуватись на професійному та соціальному рівнях;
- 2) уміння представляти та обговорювати отримані результати та здійснювати трансфер набутих знань;

**Автономія і відповідальність (АіВ):**

- 1) здатність самостійно проводити наукові дослідження у галузі біофізики та біохімії і приймати рішення;
- 2) здатність усвідомлювати необхідність навчання впродовж усієї наукової діяльності з метою поглиблення набутих та здобуття нових фахових знань;

**2.3. Перелік попередніх та супутних і наступних навчальних дисциплін**

№ п/п	Попередні навчальні дисципліни	Супутні і наступні навчальні дисципліни
1.	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	Методи квантової хімії
2.	Основи фізики рідкого стану	Фізика м'якої речовини

**3. Анотація навчальної дисципліни**

За своєю структурою запропонований курс можна розділити на чотири розділи. Перший розділ вступний. В ньому студенти ознайомляться з будовою білків та нуклеїнових кислот. Дізнаються про основні нерозв'язані проблеми для цих систем. Довідаються про основні методи розв'язку цих проблем що ґрунтуються на комп'ютерному моделюванні. В другому розділі йдеться про побудову математичних моделей для досліджень біологічних молекул у водному середовищі. Зокрема ухил робиться на моделях врахування електростатичних взаємодій та сольватації. Третій розділ стосується методів розрахунку вільної енергії в симуляціях біологічних систем. Буде розглянуто основні сучасні методи такі як термодинамічне інтегрування та ансамбль Гібса. Четвертий розділ присвячений методам пришвидшеної динаміки.

#### **4. Опис навчальної дисципліни**

##### 4.1. Лекційні заняття

№ п/п	Назви тем	К-сть годин
1	<b>Вступ до опису білків та нуклеїнових кислот</b> Архітектура білків та нуклеїнових кислот. Різні рівні представлення білків. Граткові моделі. Мінімалістичні неперервні моделі. Атомні моделі. Атомні силові поля для дослідження білків.	4
2.	<b>Електростатичні взаємодії та моделі сольватації</b> Метод реакції поля та обрізання потенціалу. Метод граткових сум. Гібридні явні/неявні моделі сольватації. Неявний розчинник. Рівняння Пуасона-Больцмана. Узагальнена модель Борна.	4
3.	<b>Методи розрахунку вільної енергії</b> Метод прямого розрахунку. Термодинамічне інтегрування. Штучне інтегрування. Ансамбль Гібса. Метод співвідношення ймовірностей. Метод нарощування частинок. Метод симуляцій “амбрела семлінг”.	4
4	<b>Моделювання методами пришвидженої динаміки</b> Підхід розширеного ансамблю. Мультиканонічний ансамбль. Метод паралельної термалізації. Симульована термалізація. Метод багатогістограмного аналізу.	4
<b>Усього годин</b>		<b>16</b>

##### 4.2. Практичні заняття

№ теми	Назви тем	Кількість годин
1	Ознайомлення з програмою GROMACS. Створення ввідних файлів. Вибір силового поля. Розмір комірки моделювання. Аналіз файлів у форматі PDB.	4
2	Сольватація молекул білка. Додавання протонів. Мінімізація початкових координат. Симуляції в різних ансамблях.	4
3	Метод симульованої термолізації. Вибір числа копій. Вибір частоти обміну копіями.	4
4	Метод “амбрела семлінг”. Створення необхідного числа вікон. Потенціал середньої сили для гідрофобних частинок.	4
<b>Усього годин</b>		16

#### 4.3. Семінарські заняття

№ теми	Назви тем	Кількість годин
1	Атомні силові поля	4
2	Вплив ансамблю симуляцій на спостережувані величини	4
3	Ефективність методу симульованої термолізації	4
4	Порівняльний аналіз різних методів розрахунку вільної енергії.	4
<b>Усього годин</b>		16

#### 4.4. Самостійна робота

№	Найменування робіт	кількість год.
1.	Дослідження першої сольватаційної сфери в білку лізоциму. Поведінка води та протонів поблизу заряджених амінокислотних лишків.	6
	Механізм згортання міні-білка Trp кейдж методом симульованої термолізації	6
	Розрахунок потенціалу середньої сили для пари амінокислот Lys-Glu у воді.	6
2.	Підготовка до навчальних занять та контрольних заходів	24
<b>Усього годин</b>		42

### 5. Методи діагностики знань

Екзамен, поточний контроль (захист індивідуального науково-дослідного завдання, активність на практичних і семінарських заняттях).

## **6. Критерії оцінювання результатів навчання студентів**

Максимальна оцінка в балах						
Поточний контроль				Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Лабораторні заняття	Практичні і семінарські заняття	Самостійна робота	Разом балів (ПК)	Письмова компонента	Усна компонента	
-	30	30	60	40	-	100

## **7. Навчально-методичне забезпечення**

Використання віртуального навчального середовища Інституту фізики конденсованих систем та авторських розробок науково-педагогічних працівників.

## **8. Рекомендована література**

### **Базова**

1. A. M. Lesk, *Introduction to Protein Architecture*, Oxford University Press, 2001.
2. А. В. Сиволюб, *Молекулярна біологія*, Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2008.
3. A. R. Leach, *Molecular Modeling: Principles and applications*, Pearson, 2001.

### **Допоміжна**

1. A. Fersht, *Structure and Mechanism in Protein Science*, W H Freeman and Company, 1999.
2. T. E. Creighton, *Proteins*, W H Freeman and Company, 2002
3. D.Frenkel, B.Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press. SanDiego,1996
4. M.Allen, D.Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford Press, London, 1988.



## **9. Інформаційні ресурси**

Віртуальне навчальне середовище Інституту фізики конденсованих систем, авторські розробки та наукові статті науково-педагогічних працівників, бібліотечний фонд Інституту фізики конденсованих систем НАН України

### 10. Узгодження з іншими навчальними дисциплінами

№ п/п	Назва дисципліни	Прізвище та ініціали викладача	Підпис
1.	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	Ільницький Я. М.	
2.	Фізика м'якої речовини	Трохимчук А. Д.	

### **11. Зміни та доповнення до робочої програми навчальної дисципліни**

№ з/п	Зміст внесених змін (доповнень)	Дата і № протоколу засідання Вченої ради	Примітки
1			
...			
N			