

**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Zastosowanie metod teoretycznych do modelowania kompleksów białek - wykład fakultatywny		13.4.0054	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
University of Gdańsk			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>pierwszego stopnia</b>
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	<b>forma</b>	stacjonarne
		<b>moduł</b>	Podstawowa
		<b>specjalnościowy</b>	Podstawowa
<b>specjalizacja</b>		Podstawowa	
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. UG, dr hab. Rajmund Kaźmierkiewicz			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		3 przedmiot w wymiarze 30h wykładu (w roku akademickim 2014/15 15h wykładu i 15h ćwiczeń) + praca własna, wykład fakultatywny do wyboru, sem. 6. student wybiera 1 przedmiot specjalizacyjny i 3 przedmioty fakultatywne (po jednym z oferty każdego współtworzącego wydziału, tzn. z: biologii, informatyki, biotechnologii i chemii)	
Wykład			
<b>Sposób realizacji zajęć</b>			
zajęcia w sali dydaktycznej			
<b>Liczba godzin</b>			
Wykład: 30 godz.			
<b>Cykl dydaktyczny</b>			
2017/2018 letni			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
praca własna - przygotowanie się do zaliczenia		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	

	<p>Ocena końcowa eseju zaliczeniowego będzie średnią ocen uzyskanych z poszczególnych zakresów wiedzy i kompetencji:</p> <p>50% oceny będzie dotyczyło wykazania, iż student zna i rozumie podstawowe pojęcia i terminologię stosowaną w bioinformatyce oraz pojęcia stosowane w dokowaniu molekularnym i pokrewnych dziedzinach nauki i dyscyplin naukowych,</p> <p>30 % oceny będzie związane z wykazaniem iż student posiada podstawową wiedzę w zakresie statystyki, informatyki i metod matematycznych pozwalających na opis prostych zależności w procesach biologicznych przy użyciu metod stosowanych w dokowaniu molekularnym,</p> <p>20% oceny będzie dotyczyło znajomości metod weryfikacji i krytycznej oceny uzyskanych wyników, student powinien umieć rozpoznać ograniczenia własnej wiedzy i umiejętności; wykazuje gotowość stałego doskonalenia, aktualizowania wiedzy i podnoszenia kwalifikacji w zakresie bioinformatyki i pokrewnych dziedzin i dyscyplin naukowych</p> <p>Esej zaliczeniowy obejmuje materiał z wykładu i oceniany jest wg wskaźnika procentowego (zgodnego z regulaminem studiów UG).</p>
--	---

### Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

#### Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

##### A. Wymagania formalne

brak

##### B. Wymagania wstępne

brak

#### Cele kształcenia

Celem przedmiotu jest zapoznanie uczestników kursu z różnymi metodami tworzenia modeli kompleksów białek w zakresie umożliwiającym rozpoczęcie samodzielnych badań. Student uzyska umiejętność tworzenia komputerowych modeli kompleksów białek, praktyczne wykorzystanie popularnych programów służących do dokowania molekularnego, umiejętność projektowania procedur mających na celu utworzenie realistycznych modeli kompleksów o znaczeniu biologicznym i umiejętność krytycznej oceny uzyskanych wyników.

W trakcie zajęć student:

K\_W04 - pozna i zrozumie podstawowe pojęcia i terminologię stosowaną w bioinformatyce oraz pojęcia stosowane w dokowaniu molekularnym i pokrewnych dziedzinach nauki i dyscyplin naukowych

K\_W05 - posiada podstawową wiedzę w zakresie statystyki, informatyki i metod matematycznych pozwalających na opis prostych zależności w procesach biologicznych przy użyciu metod stosowanych w dokowaniu molekularnym

K\_K01 - pozna metody weryfikacji i krytycznej oceny uzyskanych wyników, nauczy się rozpoznać ograniczenia własnej wiedzy i umiejętności; wykazuje gotowość stałego doskonalenia, aktualizowania wiedzy i podnoszenia kwalifikacji w zakresie bioinformatyki, dokowania molekularnego i pokrewnych dziedzin i dyscyplin naukowych

#### Treści programowe

Struktury czwartorzędowe białek, dokowanie sztywne białko-białko i białko-ligand. Optymalizacja fragmentów struktury kompleksów po wykonaniu dokowania sztywnego, relaksacja molekularna. Uwzględnianie zmian konformacyjnych cząsteczek białka, dokowanie giętkie białko-białko. Uwzględnianie częściowej ruchomości cząsteczek białka, ruchomość łańcuchów bocznych reszt aminokwasowych. Uprozczone dokowanie przy zaniedbaniu składników odpychających w funkcjach energii, dokowanie miękkie. Uwzględnianie ruchomości białka z wykorzystaniem wygenerowanego wcześniej zbioru sztywnych konformacji cząsteczki. Próbkowanie konfiguracji ligandów. Systematyczne poszukiwanie konfiguracji ligandów. Dopasowanie geometryczne składników kompleksu. Algorytmy stochastyczne wykorzystywane przy próbkowaniu konfiguracji ligandów. Wykorzystywanie algorytmów „heurystycznych” w dokowaniu. Funkcje stosowane w ocenie jakości wyników dokowania. Funkcje empiryczne, stanowiące sumę ważonych empirycznych składników energii. Funkcje oceniające oparte na wiedzy uzyskanej z analizy zawartości baz danych. Funkcje oceniające wykorzystujące pola siłowe mechaniki molekularnej. Ocena jakości dokowania ustalana na zasadzie konsensusu pomiędzy różnymi funkcjami oceniającymi. Przykładowe programy i stosowane w nich algorytmy dokujące. Wirtualne przeszukiwanie baz danych struktur ligandów, wstępna ocena specyficzności oddziaływania.

#### Wykaz literatury

##### A. Literatura podstawowa

Skrypt, "INTRODUCTION TO MOLECULAR MODELING", Rajmund Kaźmierkiewicz, Intercollegiate Faculty of Biotechnology UG&MUG, Gdańsk 2011

##### B. Literatura uzupełniająca

"Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications", Daan Frenkel

"Computer Simulation of Liquids", M.P. Allen and D.J. Tildesley. Oxford University Press, New York, 1987.

"Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods", J.M. Haile., Wiley, New York, 1992.

"Molecular Modelling. Principles and Applications", A. R. Leach, Addison Wesley Longman, Essex, England, 1996.	
<p><b>Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)</b></p> <p>K_W01 ma pogłębioną wiedzę w zakresie, biologii, informatyki, matematyki, chemii i fizyki pozwalającą na rozumienie złożonych procesów biologicznych; zna historię rozwoju biologii i informatyki oraz ich znaczenie dla postępu nauk ścisłych i przyrodniczych, poznania świata i rozwoju społecznego; posiada wiedzę o aktualnych kierunkach rozwoju biologii i informatyki, a w szczególności w obszarze bioinformatyki</p> <p>K_W02 posiada pogłębioną wiedzę w zakresie metod matematycznych, statystycznych i komputerowych, konieczną do rozwiązywania problemów bioinformatycznych o średnim poziomie złożoności; zna i upowszechnia zasadę ścisłego, opartego na danych empirycznych, interpretowania zjawisk i procesów biologicznych</p> <p>K_W03 zna zaawansowane techniki doświadczalne, obserwacyjne i komputerowe pozwalające zaplanować i wykonać złożony eksperyment biologiczny, analizę bioinformatyczną lub symulację komputerową</p> <p>K_W04 zna podstawowe konstrukcje programistyczne oraz pojęcia składni i semantyki języków programowania; zna podstawowe metody projektowania, analizowania i programowania algorytmów; zna podstawowe struktury danych i wykonywane na nich operacje</p> <p>K_W08 ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w naukach ścisłych i przyrodniczych</p> <p>K_U01 potrafi zastosować wiedzę matematyczną i informatyczną do formułowania, analizowania i rozwiązywania prostych zadań związanych z bioinformatyką</p> <p>K_U06 projektuje, analizuje pod kątem poprawności i złożoności obliczeniowej oraz programuje algorytmy; wykorzystuje podstawowe techniki algorytmiczne i struktur danych</p> <p>K_U07 posługuje się przyjętymi formatami reprezentacji różnego rodzaju danych stosownie do sytuacji, pamiętając o ich ograniczeniach</p> <p>K_U08 potrafi stosować podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do prezentacji wyników i analizy danych</p> <p>K_U09 stosuje wybrane techniki i narzędzia badawcze z dziedzin nauk przyrodniczych i ścisłych</p> <p>K_K01 zna ograniczenia własnej wiedzy i rozumie potrzebę dalszego kształcenia</p> <p>K_K02 potrafi precyzyjnie formułować problemy służące pogłębieniu zrozumienia danego tematu</p> <p>K_K03 ma świadomość i zrozumienie społecznych aspektów praktycznego stosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związanej z tym odpowiedzialności</p>	<p><b>Wiedza</b></p> <p>K_W01 ma pogłębioną wiedzę w zakresie, biologii, informatyki, matematyki, chemii i fizyki pozwalającą na rozumienie złożonych procesów biologicznych; zna historię rozwoju biologii i informatyki oraz ich znaczenie dla postępu nauk ścisłych i przyrodniczych, poznania świata i rozwoju społecznego; posiada wiedzę o aktualnych kierunkach rozwoju biologii i informatyki, a w szczególności w obszarze bioinformatyki</p> <p>K_W02 posiada pogłębioną wiedzę w zakresie metod matematycznych, statystycznych i komputerowych, konieczną do rozwiązywania problemów bioinformatycznych o średnim poziomie złożoności; zna i upowszechnia zasadę ścisłego, opartego na danych empirycznych, interpretowania zjawisk i procesów biologicznych</p> <p>K_W03 zna zaawansowane techniki doświadczalne, obserwacyjne i komputerowe pozwalające zaplanować i wykonać złożony eksperyment biologiczny, analizę bioinformatyczną lub symulację komputerową</p> <p>K_W04 - zna i rozumie podstawowe pojęcia i terminologię stosowaną w bioinformatyce oraz pojęcia pokrewnych dziedzin nauki i dyscyplin naukowych</p> <p>K_W05 - posiada podstawową wiedzę w zakresie statystyki, informatyki i metod matematycznych pozwalających na opis prostych zależności w procesach biologicznych</p> <p>K_W08 ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w naukach ścisłych i przyrodniczych</p> <p><b>Umiejętności</b></p> <p>K_U01 potrafi zastosować wiedzę matematyczną i informatyczną do formułowania, analizowania i rozwiązywania prostych zadań związanych z bioinformatyką</p> <p>K_U06 projektuje, analizuje pod kątem poprawności i złożoności obliczeniowej oraz programuje algorytmy; wykorzystuje podstawowe techniki algorytmiczne i struktur danych</p> <p>K_U07 posługuje się przyjętymi formatami reprezentacji różnego rodzaju danych stosownie do sytuacji, pamiętając o ich ograniczeniach</p> <p>K_U08 potrafi stosować podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do prezentacji wyników i analizy danych</p> <p>K_U09 stosuje wybrane techniki i narzędzia badawcze z dziedzin nauk przyrodniczych i ścisłych</p> <p><b>Kompetencje społeczne (postawy)</b></p> <p>K_K01 - zna ograniczenia własnej wiedzy i umiejętności; wykazuje gotowość stałego doskonalenia, aktualizowania wiedzy i podnoszenia kwalifikacji w zakresie biotechnologii i pokrewnych dziedzin i dyscyplin naukowych</p> <p>K_K02 potrafi precyzyjnie formułować problemy służące pogłębieniu zrozumienia danego tematu</p> <p>K_K03 ma świadomość i zrozumienie społecznych aspektów praktycznego stosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związanej z tym odpowiedzialności</p>
<p><b>Kontakt</b></p> <p>rajmund.kazmierkiewicz@biotech.ug.edu.pl</p>	