



**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Modelowanie struktury biocząstek		11.3.1556	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii Teoretycznej			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>pierwszego stopnia</b>
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Cezary Czuplewski, profesor uczelni			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		5	
Wykład, Ćw. laboratoryjne			
<b>Sposób realizacji zajęć</b>			
zajęcia w sali dydaktycznej			
<b>Liczba godzin</b>			
Ćw. laboratoryjne: 60 godz., Wykład: 15 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2022/2023 zimowy			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Wykład z prezentacją multimedialną</li> <li>- wykonywanie ćwiczeń w pracowni komputerowej</li> <li>•praca własna - przygotowanie projektu zaliczeniowego</li> <li>•praca własna - przygotowanie sprawozdań</li> </ul>		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Zaliczenie na ocenę</li> <li>- Egzamin</li> </ul>	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>- egzamin pisemny testowy</li> <li>- ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych otrzymywanych w trakcie trwania semestru</li> </ul>	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	

## Wykład:

- Egzamin pisemny składający się z testu **wielokrotnego wyboru**
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
- Studenci, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na egzamin ustny. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
- Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku student otrzymuje szansę uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego). W tym przypadku nie ma możliwości poprawienia oceny z pierwszego terminu zaliczenia na wyższą.
- Negatywna ocena z egzaminu (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas egzaminu poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co egzamin w pierwszym terminie.
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.

## Ćwiczenia laboratoryjne:

- Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
- Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
- Zaliczenie wszystkich kolokwiów wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
- Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwiów pisemnych (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%).
- Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.
- Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

**Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się**

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Poziom przyswojenia wiedzy przez studenta jest weryfikowany na egzaminie zaliczającym przedmiot (K\_W04).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Nabycie przez studenta umiejętności jest weryfikowane w czasie egzaminu zaliczającego przedmiot, w ocenie projektu zaliczeniowego oraz pisemnych sprawozdaniach z realizacji ćwiczeń a także poprzez obserwację aktywności na zajęciach (K\_U02, K\_U03).

**Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi****A. Wymagania formalne**

- Python z podstawami algorytmiki
- Metody numeryczne dla bioinformatyków
- Metody matematyczne bioinformatyki

**B. Wymagania wstępne**

- Umiejętność pracy w systemie Unix
- Umiejętność programowania w języku Python

**Cele kształcenia**

Praktyczne zapoznanie studentów z technikami i narzędziami chemii obliczeniowej wykorzystywanymi w modelowaniu molekularnym białek ze szczególnym uwzględnieniem modelowania białek i dokowania molekularnego

**Treści programowe**

Wizualizacja struktury i dynamiki białek oraz innych makrocząsteczek (z wykorzystaniem programów Pymol, Chimera, Vmd). Symulacje dynamiki molekularnej w modelu pełnoatomowym (programy z pakietów Amber i Gromacs) i gruboziarnistym (modele UNRES, Martini). Dokowanie molekularne (program AutoDock Vina). Parametryzacja empirycznych pól siłowych dla ligandów i aminokwasów niebiałkowych z wykorzystaniem metod chemii kwantowej (antechamber z pakietu Amber, obliczenia kwantowochemiczne w programach Gamess i Gaussian). Przewidywanie struktury białek i ich kompleksów, przedstawienie CASP i CAPRI (wykorzystanie programów i portali internetowych takich jak Modeller, I-TASSER, UNRES-server, ClusPro, UNRES-Dock, CABS-dock). Wykorzystanie samodzielnie napisanych programów w języku Python do opracowania i wizualizacji wyników obliczeń i symulacji.

## Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

- <https://ambermd.org/>
- <http://manual.gromacs.org/documentation/>
- <https://predictioncenter.org/index.cgi>
- <https://www.capri-docking.org/>
- <https://salilab.org/modeller/>
- Rozdział 13. Komputery w chemii medycznej z Chemia medyczna. Podstawowe zagadnienia, Graham Baker, Graham L. Patrick, WNT 2003

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

- dostępne w Internecie materiały o wykorzystywanych w czasie zajęć programach i portalach internetowych

B. Literatura uzupełniająca

- Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, Heermann Dieter W., WNT 1997
- Idee chemii kwantowej, Lucjan Piela, PWN 2005
- Molecular Modelling: Principles and Applications, Andrew Leach, Prentice Hall 2001

## Kierunkowe efekty uczenia się

KW\_04 Ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w bioinformatyce  
 KU\_02 Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką  
 KU\_03 Stosuje podstawowe metody matematyczne i statystyczne do opisu zjawisk i analizy danych; posiada umiejętność podstawowej analizy danych w profesjonalnych bazach danych wykorzystywanych w bioinformatyce

## Wiedza

Student nazywa i opisuje podstawowe metody modelowania molekularnego. Rozróżnia metody chemii kwantowej od metod mechaniki molekularnej oraz deterministyczne i stochastyczne metody symulacji komputerowych. Charakteryzuje przybliżenia wykorzystane w empirycznych polach siłowych. Rozróżnia modele pełnoatomowe od gruboziarnistych, zna ich wady i zalety. Zna podstawy dokowania molekularnego. Zna metody przewidywania struktur białek i ich kompleksów. Opisuje na czym polegają eksperymenty oceniające skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek (Critical Assessment of protein Structure Prediction = CASP) i ich kompleksów (Critical Assessment of PRediction of Interactions = CAPRI).

## Umiejętności

Student wybiera odpowiednią metodę modelowania molekularnego do wspomżenia pracy eksperymentalnej. Potrafi zastosować różne metody wizualizacji struktury i dynamiki białek oraz innych makrocząsteczek. Prowadzi symulacje komputerowe w wybranych programach służących do modelowania struktury i dynamiki białek, analizuje wyniki symulacji komputerowych z wykorzystaniem samodzielnie napisanych programów w języku Python, porównuje wyniki obliczeń z danymi eksperymentalnymi. Stosuje dokowanie molekularne do modelowania kompleksów białek z ligandami. Parametryzuje empiryczne pole siłowe z wykorzystaniem obliczeń kwantowochemicznych. Przewiduje struktury białek i ich kompleksów z wykorzystaniem wybranych programów i portali internetowych. Potrafi wykorzystać wyniki eksperymentów CASP i CAPRI oceniających skuteczność teoretycznych metod przewidywania struktur białek i ich kompleksów do wyboru stosowanych metod obliczeniowych.

## Kompetencje społeczne (postawy)

Student poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na komputerach podłączonych do sieci. Wykazuje odpowiedzialność za konto osobiste w wielodostępnym systemie komputerowym oraz za bezpieczeństwo jego zasobów. Pracuje samodzielnie oraz w grupie.

## Kontakt

cezary.czaplewski@ug.edu.pl