



## Дисципліна: «КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БІОПОЛІМЕРІВ»

ДВА.3.01.17 Дисципліна вільного вибору аспіранта

### ВИКЛАДАЧ:

докт. біол. наук, професор, член-корреспондент НАН України Корнелюк Олександр Іванович, e-mail: kornelyuk@imbg.org.ua

### ЗАГАЛЬНЕ НАВАНТАЖЕННЯ: 3 ECTS

Загальний обсяг вивчення – 90 годин, у тому числі:

- Заняття в аудиторії: 30 годин (12 годин лекцій, 10 годин семінарів, 6 годин модульні контрольні роботи, 2 години консультація)
- Самостійна робота: 60 годин

Підсумковий контроль дисципліни – іспит

### АНОТАЦІЯ

Курс «Комп'ютерне моделювання біополімерів» присвячений одному з найбільш актуальних напрямків молекулярної біології – комп'ютерній біології, яка ґрунтується на принципах та засадах сучасної науки з використанням новітніх комп'ютерних методів. Інтенсивний розвиток цієї галузі має велике значення для розвитку новітніх біотехнологій, які базуються на використанні методів *in silico*, в тому числі нанобіотехнологій. Розвиток комп'ютерних методів в біології обумовлений стрімким прогресом в секвенуванні геномів багатьох організмів, включаючи геном людини, а також суттєво змінив стан сучасної молекулярної біології і нині впливає на інші розділи біології та медицини. В курсі детально розглядаються фундаментальні досягнення у вивченні структури і функцій білків, виникнення і розвиток комп'ютерної біології і біоінформатики, застосування цих знань для дизайну білків та нових наноконструктивних комплексів, застосування білків у біомедицині.

### МЕТА І ЗАВДАННЯ КУРСУ:

Метою курсу «Комп'ютерне моделювання біополімерів» є опанування здобувачами базових знань, основних понять і теоретичних засад стосовно принципів організації та функціонування біологічних макромолекул, методів комп'ютерного моделювання структури і молекулярної динаміки білків, розвиток у здобувачів вмінь застосовувати фундаментальні знання у галузі молекулярної біології у практичній діяльності, спрямованій на використання біополімерів та їх комплексів у медицині. Основними завданнями є: 1) ознайомлення з основними напрямками сучасної молекулярної біології, структурною організацією білків та надмолекулярних комплексів, методами протеоміки, експериментальними методами вивчення структури та динаміки білків, принципів фолдинга білків та ролі молекулярних шаперонів; 2) ознайомлення з комп'ютерними базами послідовностей білків та нуклеїнових кислот. Основні характеристики банків даних. GenBank, EMBL, Uniprot (SwissProt і TrEMBL). Комп'ютерні методи моделювання вторинної та третинної структури білків. Моделювання структури білків по гомології, програми моделювання WhatIf, Modeller, Swiss-Model. Моделювання структури білків *ab initio*; 3) ознайомлення з основами комп'ютерних ґрід-технологій, ґрід-мережі для досліджень в галузі молекулярної біології. Український національний ґрід: структура, віртуальні організації, віртуальною лабораторією MolDynGrid та її використання для моделювання молекулярної динаміки білків

## РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ, МЕТОДИ ВИКЛАДАННЯ І ФОРМИ ОЦІНЮВАННЯ

Результати навчання	Методи викладання і навчання	Форми оцінювання
<p><i>Здобувач повинен знати:</i> структуру і функції нуклеїнових кислот і білків, молекулярні механізми збереження і реалізації генетичної інформації, методи аналізу біологічних послідовностей та просторових структур біологічних макромолекул.</p> <p><i>Здобувач повинен вміти:</i> творчо використовувати у навчальній, дослідницькій та викладацькій діяльності знання щодо механізмів функціонування біологічних макромолекул, працювати з банками даних біологічних послідовностей в мережі Інтернет, володіти комп'ютерними програмами роботи з біологічними послідовностями, вміти цілісно і системно мислити.</p>	Лекції; семінарські заняття	Модульні контрольні роботи; Доповіді на семінарських заняттях; Іспит з дисципліни;

### ЗМІСТ КУРСУ

Дисципліна «Комп'ютерне моделювання біополімерів» належить до переліку дисциплін вільного вибору здобувача. Вона забезпечує особистісний і професійний розвиток здобувача та спрямована на формування бази знань, достатньої для подальшої успішної самостійної дослідницької роботи при проведенні досліджень по комп'ютерному моделюванню біополімерів та аналізу просторових структур біологічних макромолекул. Дисципліна сприяє формуванню у здобувачів цілісного і системного погляду на організацію біологічних структур на молекулярному рівні та дозволяє підготувати здобувача як ефективного викладача вищої школи і аналітика зі спеціальної літератури по комп'ютерному моделюванню.

Дисципліна «Комп'ютерне моделювання біополімерів» передбачає три змістовні модулі, а саме: ЗМ1: Структурна організація білків та супрамолекулярних комплексів (1 кредит); ЗМ2: Комп'ютерні методи аналізу та моделювання структури білків. (1 кредит); ЗМ3: Основи комп'ютерних ґрид-технологій. Віртуальна лабораторія MolDynGrid та її використання для моделювання молекулярної динаміки білків (1 кредит).

### Тематичний план лекцій та семінарських занять

Номер лекції	Назва лекції	Кількість годин			
		Лекції	Семінари	СР	Модульні контрольні роботи
<b>ЗМ1: Структурна організація білків та супрамолекулярних комплексів. (1 кредит)</b>					
1	Геноміка, протеоміка і біоінформатика – основні напрямки сучасної молекулярної біології. Рівні структурної організації біополімерів. Надмолекулярні структури. Протеом клітини, методи протеоміки.	1		5	
2	Експериментальні методи вивчення просторової структури білків. Динаміка білків. Фолдинг білків. Молекулярні шаперони, їх роль у фолдингу білків.	2	2	10	
3	Природно неструктуровані білки. Конформаційні хвороби.	1		5	2
<b>ЗМ2: Комп'ютерні методи аналізу та моделювання структури білків. (1 кредит).</b>					
4	Комп'ютерні бази даних послідовностей нуклеїнових кислот та білків ( <i>GenBank, Swiss-Prot</i> та ін.) Банки даних геномних проєктів. Спеціалізовані банки даних.	1		5	
5	Комп'ютерні методи моделювання вторинної та третинної структури білків. Комп'ютерні сервери інформаційної мережі "Internet". Комп'ютерні бази даних просторових структур білків та нуклеїнових кислот.	1	2	5	
6	Моделювання структури білків по гомології. Програми моделювання просторової структури білків, пакет "WhatIf", програма "Modeller". Сервер "Swiss-Model". Моделювання структури білків <i>ab initio</i> .	2	2	10	2
<b>ЗМ3: Основи комп'ютерних ґрід-технологій. Віртуальна лабораторія MolDynGrid та її використання для моделювання молекулярної динаміки білків.</b>					

<b>(1 кредит).</b>					
7	Основи комп'ютерних ґрід-технологій. Ґрід-мережі для досліджень в галузі молекулярної біології.	1		5	
8	Український національний ґрід: структура, віртуальні організації.	1	2	5	
9	Віртуальна лабораторія MolDynGrid та її використання для моделювання молекулярної динаміки білків.	2	2	10	2
<b>ВСЬОГО</b>		<b>12</b>	<b>10</b>	<b>60</b>	<b>6</b>

**Протягом курсу передбачається виконання таких індивідуальних завдань:**

№ з/п	Теми занять
Індивідуальне завдання 1	Тема: Основи роботи з ресурсами таксономічної бази даних Національного центру біотехнологічної інформації NCBI. Мета: Ознайомитись з основними принципами роботи з таксономічною базою даних NCBI, та отримати навички пошуку біологічних даних використовуючи онлайн ресурси.
Індивідуальне завдання 2	Тема: Аналіз біологічних послідовностей за допомогою спеціалізованих Internet-сервісів. Мета: Навчитися аналізувати амінокислотні та нуклеотидні послідовності, використовуючи веб-інструменти ProtParam (аналіз фізико-хімічних властивостей білків), BLAST (аналіз подібності/ гомології послідовностей) та ORF (пошук відкритих рамок зчитування).
Індивідуальне завдання 3	Тема: Комп'ютерні методи моделювання третинної структури білків. Комп'ютерні ґрід-технології та їх застосування для вирішення задач молекулярної біології. Мета: Ознайомитись з основними методиками моделювання просторової структури білків, використовуючи відповідні веб-інструменти. Провести моделювання просторової структури білка в SwissModel з примусовим вибором матриці. Оптимізувати структури моделей за допомогою програмного забезпечення HyperChem. Порівняти оптимізовані та неоптимізовані структури за допомогою програми SwissPdbViewer. Ознайомитись з принципами використання ґрід-технологій та їх застосуванням для моделювання молекулярної динаміки біомолекул. За допомогою аналізу траєкторій молекулярної динаміки отримати інформацію про флуктуації та конформаційні зміни білків, нуклеїнових кислот та макромолекулярних комплексів, динамічні та термодинамічні параметри біополімерів. Ознайомлення з програмним пакетом GROMACS для розрахунків МД.

**УМОВИ ВИЗНАЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОГО РЕЙТИНГУ**

Контроль знань здобувачів здійснюється за модульно-рейтинговою системою. Підсумкова оцінка розраховується за **накопичувальною системою**. При цьому максимальна кількість балів встановлюється наступним чином:

Курс	модуль 1	модуль 2	модуль 3	іспит	Підсумкова оцінка за повний курс
Максимальна кількість балів	25	25	25	25	100

Остаточна підсумкова оцінка враховує оцінки за кожний модуль.

Протягом курсу заплановані контрольні та самостійні роботи до кожного модуля:  
за контрольну роботу здобувач може отримати максимум 20 балів;  
за самостійне завдання – максимум 5 балів;  
за кожен змістовний модуль – максимум 25 балів.

### ВИМОГИ І КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ

Оцінювання успішності здобувача за кожним із запланованих видів робіт здійснюється у відповідності до таких критеріїв:

Вид роботи	Кількість балів за один вид робіт	Критерії оцінювання
Індивідуальне завдання	5	Завдання виконано логічно та послідовно. Автор демонструє володіння матеріалом і здатність відповісти на запитання викладача.
	4-3	Завдання виконано з незначними помилками й неточностями, автор в цілому задовільно відповідає на запитання викладача.
	1-2	Завдання виконано зі значними помилками та прогалинами. Автор не виявляє належної підготовки і не готовий відповідати на змістовні запитання.
Модульна контрольна робота (письмова)	18-20	Роботу виконано вчасно, якісно оформлено. Автор виявляє високий рівень знань і розуміння теми, аналітичні здібності, відповідає на запитання правильно, логічно й послідовно.
	14-17	Роботу виконано вчасно, якісно оформлено. Наявні тільки незначні помилки чи неточності у відповідях на запитання. Автор виявляє достатню обізнаність і розуміння матеріалу.
	10-13	Роботу виконано вчасно, та оформлено з помилками. Автор демонструє посередню обізнаність і розуміння матеріалу, допускає певну кількість грубих помилок.
	5-9	Завдання не виконане вчасно або якість його оформлення незадовільна. Автор виявляє погану обізнаність і розуміння матеріалу, допускає велику кількість грубих помилок.

### Порядок перерахунку рейтингових показників нормованої 100-бальної шкали оцінювання в національну шкалу та шкалу ECTS

За 100-бальною шкалою	За національною шкалою		За шкалою ECTS
	Іспит	Залік	
91 – 100	відмінно	зараховано	<b>A</b> (відмінно)
81 – 90	добре		<b>B</b> (дуже добре)
71 – 80			<b>C</b> (добре)
66 – 70			<b>D</b> (задовільно)
60 – 65	<b>E</b> (достатньо)		
40 – 59	незадовільно	не зараховано	<b>FX</b> (незадовільно – з можливістю повторного складання)
1 – 39			<b>F</b> (неприйнятно – з обов’язковим повторним курсом)

*Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю здобувач отримав сумарну оцінку за три змістовні модулі, яка менша за 40 балів, то він/вона не допускається до екзамену і вважається таким, що не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом.*

### ПОЛІТИКА ДОБРОЧЕСНОСТІ

Виконання навчальних завдань і робота в курсі має відповідати вимогам «Кодексу академічної доброчесності ІМБГ НАНУ», затвердженого Вченою радою ІМБГ НАН України 10 вересня 2019 року, [http://imbg.org.ua/docs/education/IMBG\\_academic\\_integrity\\_code.pdf](http://imbg.org.ua/docs/education/IMBG_academic_integrity_code.pdf)

### РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

#### Рекомендовані посібники

1. Сиволоб А.В. Молекулярна біологія. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2008.- 384 с. [http://www.biol.univ.kiev.ua/public/pidruch/MolBiol\\_sivolob.pdf](http://www.biol.univ.kiev.ua/public/pidruch/MolBiol_sivolob.pdf)
2. Кантор Ч., Шиммель П. Биофизическая химия, тт.1,2,3.- М.: Мир.-1984-1985.
3. Льюин Б. Гены. – М.: Мир, 1987.
4. Патрушев Л.И. Искусственные генетические системы. Т.1. Генная и белковая инженерия. М.: Наука. □ 2004.

5. Степанов В.М. Молекулярная биология. Структура и функции белков. – М.:”Высшая школа”. 1996.
6. Финкельштейн А.В. Введение в физику белка.- М., 2000.
7. Чернавский Д.С., Чернавская Н.М. Белок – машина. Биологические макромолекулярные конструкции. – М.Изд-во МГУ. □ 1999.
8. Шульц Г., Ширмер Р., Принципы структурной организации белков. М.: Мир. □ 1982.
9. Branden C., Tooze J. Introduction to Protein Structure (Garland, New York & London). □ 1991.
10. Campbell M. Heyer L. Discovering Genomics, Proteomics and Bioinformatics, CSHL Press, 2003, 352 p.
11. Computer modeling in molecular biology. Ed. J. M. Goodfellow. VCH. □ 1995. □ 243 с.
12. Concepts in Protein Engineering and Design. Eds.P.Wrede, G.Schneider. 1994.
13. Creighton T. Proteins:Structure and Molecular Properties (Freeman,New York). 1992.

#### **Рекомендовані електронні ресурси**

1. Авторський навчальний веб-модуль: <http://edu.imbg.org.ua>
2. Віртуальна лабораторія MolDynGrid (<https://moldyngrid.org/main.php>).
3. WeNMR (<http://www.wenmr.eu>)
4. ViroLab (<http://www.virolab.org>).