

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
Заступник директора  
з науково-педагогічної роботи  
Галина ГРАБЧУК  
« 04 » березня 2021 року  
Протокол 29

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**  
**Основи обчислювальної структурної біології**

*(повна назва навчальної дисципліни)*

**для студентів**

галузь знань 091 Біологія  
*(цифра і назва)*  
спеціальність 091 Біологія  
*(цифра і назва спеціальності)*  
освітній рівень Бакалавр  
*(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)*  
освітня програма Біологія (високі технології)  
*(назва освітньої програми)*  
вибірковий блок Нанотехнології в біології  
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	7
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: Войтешенко Іван Сергійович

*(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)*

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*


на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*

КИЇВ – 2021

Розробник: *(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)*  
Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент, кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

  
Олексій НИПОРКО

Протокол № 4 від «05» листопада 2021р.

Схвалено науково - методичною комісією  
«Інституту високих технологій»  
Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «08» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії  (Русінчук Н.М.)

«05» 03 2021 року

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – навчити студентів орієнтуватися у сучасних концепціях обчислювальної структурної біології, дати детальні уявлення про просторову організацію та ієрархічність структури біологічних макромолекул, методи її відтворення та дослідження структурних змін в біологічних процесах, сформувавши у студентів цілісний та системний погляд на структурну організацію молекулярного рівня біологічних систем та методів його опису.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

- 1. Знати основні концепції відтворення просторової структури біополімерів та їхніх комплексів між собою та із низькомолекулярними сполуками, основні концепції аналізу їх просторової організації, основи дослідження поведінки макромолекул та їхніх структурних переходів та/або перетворень.*
- 2. Вміти реконструювати просторову структуру біополімерів та їхніх комплексів між собою та із низькомолекулярними сполуками, розраховувати поведінку і аналізувати особливості просторової структури білків, вміти цілісно і системно мислити.*
- 3. Володіти основним апаратом математичного аналізу, лінійної алгебри, основами програмування та алгоритмізації.*

**3. Анотація навчальної дисципліни (до 700 символів):**

*Предметом навчальної дисципліни «Основи обчислювальної структурної біології» є вивчення структурних та динамічних властивостей основних класів біополімерів сучасними методами.*

*У курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до вивчення просторової будови, властивостей основних класів біополімерів, їхніх основ функціонування та конформаційних змін. Також, розглядаються методичні підходи до відтворення і аналізу отриманої інформації про біополімери.*

**4. Завдання (навчальні цілі) (до 500 символів):**

Навчання дисципліни має на меті розвивати у студентів такі загальні та фахові компетентності:

ЗК03. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК04. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК05. Здатність спілкуватися державною мовою як усно так і письмово.

ЗК07. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК08. Здатність до абстрактного мислення, аналізу і синтезу.

СК01. Здатність застосовувати знання та вміння з математики, фізики, хімії та інших суміжних наук для вирішення конкретних біологічних завдань.

СК02. Здатність демонструвати базові теоретичні знання в галузі біологічних наук та на межі предметних галузей.

СК03. Здатність досліджувати різні рівні організації живого, біологічні явища і процеси.

СК04. Здатність здійснювати збір, реєстрацію і аналіз даних за допомогою відповідних методів і технологічних засобів у польових і лабораторних умовах.

СК05. Здатність до критичного осмислення новітніх розробок у галузі біології і професійній діяльності.

СК07. Здатність до аналізу будови, функцій, процесів життєдіяльності, онто- та філогенезу живих організмів.

СК08. Здатність до аналізу механізмів збереження, реалізації та передачі генетичної інформації в організмів.

СК09. Здатність аналізувати результати взаємодії біологічних систем різних рівнів організації, їхньої ролі у біосфері та можливості використання у різних галузях господарства, біотехнологіях, медицині та охороні навколишнього середовища.

СК11. Вміння формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.

СК12. Здатність використовувати та модифікувати сучасні біотехнології для вирішення актуальних біологічних проблем.

**5. Результати навчання за дисципліною:** (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	<i>Знати просторову будову, властивості двох основних класів біополімерів: нуклеїнових кислот та білків, а також методи дослідження структурних властивостей білків та нуклеїнових кислот. Ознайомлення зі спеціальним програмним забезпеченням для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів біополімерів, методичні підходи до відтворення і аналізу отриманої інформації про біополімери.</i>	<i>лекції</i>	<i>Теоретичні запитання на іспиті</i>	40%
2.1	<i>Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів біополімерів. Аналіз та інтерпретація отриманої інформації про біополімери.</i>	<i>Лабораторні роботи</i>	<i>Звіти по лабораторних роботах</i> <i>Задача на заліку</i>	30%
4.1	<i>Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору моделі, підходів, програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів у біополімерах.</i>	<i>Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>Звіти по лабораторних роботах</i>	30%

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання** (необов'язково для вибіркових дисциплін які не входять до блоків спеціалізації)

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1	4.1
<b>Програмні результати навчання</b>			
<i>ПР2. Застосовувати сучасні інформаційні технології, програмні засоби та ресурси Інтернету для інформаційного забезпечення професійної діяльності.</i>	+	+	+
<i>ПР6. Застосовувати моделі, методи і дані фізики, хімії, екології, математики у процесі навчання та забезпечення професійної діяльності.</i>		+	+
<i>ПР8. Знати та розуміти основні терміни, концепції, теорії і закони в галузі біологічних наук і на межі предметних галузей.</i>	+	+	+
<i>ПР11. Розуміти структурну організацію біологічних систем на молекулярному рівні.</i>	+	+	+
<i>ПР13. Знати механізми збереження, реалізації та передачі генетичної інформації та їхнє значення в еволюційних процесах.</i>	+		+

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

\*

<i>ПР17. Розуміти роль еволюційної ідеї органічного світу.</i>	+		+
<i>ПР19. Застосовувати у практичній діяльності методи визначення структурних та функціональних характеристик біологічних систем на різних рівнях організації.</i>	+	+	
<i>ПР24. Аналізувати фізико-хімічні властивості та функціональну роль біологічних макромолекул і молекулярних комплексів живих організмів, характер взаємодії їх з іонами, молекулами і радикалами, їхню будову й енергетику процесів.</i>	+	+	+
<i>ПР26. Застосовувати та модифікувати сучасні біотехнології для вирішення актуальних біологічних проблем.</i>		+	+

## 7. Схема формування оцінки.

**7.1 Форми оцінювання студентів:** (зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю / оцінювання із зазначенням результатів навчання які на них мають бути оцінені, а також кількість балів/відсоток у підсумковій оцінці із дисципліни, пороговий рівень позитивної оцінки)

**- семестрове оцінювання:**

1. Звіти по лабораторних роботах: РН 2.1. - 60 балів/36 балів.

**- підсумкове оцінювання (у формі екзамену/комплексного екзамену, диференційованого заліку) вказується:**

- Письмовий іспит: 2 розгорнуті питання по 20 балів (40 балів/0 балів, оцінює РН 1.1).

- Максимальна кількість балів які можуть бути отримані студентом - 40 балів;

- Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів;

- Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

- Студент допускається до іспиту за умови виконання необхідної кількості передбачених планом лабораторних робіт.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Підсумкове оцінювання	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

**7.2 Організація оцінювання:** (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням орієнтовного графіку оцінювання).

Протягом семестру студенти виконують лабораторні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.

Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та лабораторних занять.

Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (36 балів), для одержання допуску до іспиту обов'язковим є виконання додаткових завдань.

## 7.3 Шкала відповідності оцінок

<b>Відмінно / Excellent</b>	90-100
<b>Добре / Good</b>	75-89
<b>Задовільно / Satisfactory</b>	60-74
<b>Незадовільно / Fail</b>	0-59

**8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і семінарських / практичних / лабораторних (вибрати необхідне) занять**

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
<i>Назва розділу чи частини I (якщо здійснюється поділ)</i>				
1	<b>Вступ.</b> <b>Тема 1.</b> Молекулярне моделювання як наука. Особливості хімічного складу живої матерії.	3	0	6
2	<b>Тема 2.</b> Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують будову біологічних макромолекул. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій.	2	0	4
3	<b>Тема 3.</b> Моделювання молекулярних структур.	2	0	4
4	<b>Тема 4.</b> Методи моделювання молекулярних структур: квантово-хімічні методи.	2	0	4
5	<b>Тема 5.</b> Дослідження на прикладі пакету - Gaussian основних властивостей молекул.	2	2	4
6	<b>Тема 6.</b> Найпоширеніші теорії для прикладних розрахунків та види базисних наборів.	2	0	4
7	<b>Тема 7.</b> Пошук перехідних станів та координат реакції.	2	4	4
8	<b>Тема 8.</b> Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне зв'язування, основи теорії атомів у молекулах.	2	2	4
9	<b>Тема 9.</b> Структурна біоінформатика як наука.	3	0	6
10	<b>Тема 10.</b> Методи вивчення взаємодій та структури біополімерів.	2	0	4
11	<b>Тема 11.</b> Аналіз молекулярних структур.	2	0	4
12	<b>Тема 12.</b> Дослідження на прикладі пакету – Gromacs.	2	0	6
13	<b>Тема 13.</b> Алгоритми побудов нейронних мереж і перспективи використання. Основи нейромереж.	2	2	4
14	<b>Тема 14.</b> Методи оптимізації.	2	2	4
15	<b>Тема 15.</b> Підготовка даних для навчання нейромереж і їхнє навчання.	2	2	4
16	<b>Тема 16.</b> Основи програмування на Python, реалізація нейромереж та використання для біоінформатичних задач	2	2	4
18	<b>Контрольна робота</b>	-	-	-
19	<b>ВСЬОГО</b>	34	16	70

\*Примітка: слід зазначити також теми, винесені на самостійне вивчення

**Загальний обсяг 50 год., в тому числі (вибрати необхідне):**

Лекцій – 34 год.

Лабораторні заняття - 16 год.

Самостійна робота - 70 год.

## 9. Рекомендовані джерела:

### Основна:

1. Computational Structural Biology: Methods and Applications edited by Torsten Schwede, by Manuel C. Peitsch World Scientific Publishing Co Pte Ltd – Singapore/SG, 2008
2. Zhijun Wu Lecture Notes on Computational Structural Biology World Scientific Publishing Co Pte Ltd – Singapore/SG, 2008
3. Structural Bioinformatics edited by Philip E. Bourne, Helge Weissig Willey-Liss. – New Jersey, 2009
4. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с
5. Foresman J. B. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. B. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.
6. Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов н/Д : Феникс, 1997. – 560 с.
7. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – М. : Химия, 1986. – 412 с.
8. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: Основы теории и работа с программами GAUSSIAN и GAUSSVIEW. Солон-пресс, 2011. -224 с.
9. Рашид, Тарик. С58 Создаем нейронную сеть.: Пер. с англ. — СПб. : ООО “Альфа-книга”,. 2017. — 272 с

### Додаткова:

1. Ochterski Joseph W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc. 2000 –19 p.
2. Кантор Ч., Шиммел П. Биофизическая химия. - М.: Мир. 1984-1985. - Т. 1-3.
3. Романовский Ю.М.. Степанова М.В.. Чернавский Д.С. Математическая биофизика. - М.: Наука. 1984.
4. Васильев А.Н. Python на примерах. Практический курс по программированию. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2016 рік, 432 с.
5. Васильев А.Н. Самоучитель Matlab. Практический подход. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2012 рік, 448 с.
6. Интегрированный ресурс Национального центра биотехнологической информации США (National Center for Biotechnology Information , NCBI – <http://www.ncbi.nlm.nih.gov>)  
як правило - до 20 джерел

## 10. Додаткові ресурси (за наявності):

1. The official Gaussian website <http://www.gaussian.com/index.htm>
2. Проект Ensembl з анотації геномів <http://www.ensembl.org/index.html>
3. Банк даних білкових послідовностей Uniprot
4. Міжнародний банк білкових структур [www.rcsb.org](http://www.rcsb.org)
5. <https://www.tensorflow.org/tutorials>