

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Инженерный институт



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Математическое моделирование биологических процессов и систем

Направление подготовки: 12.04.04 - Биотехнические системы и технологии

Профиль подготовки: Медико-биологические аппараты, системы и комплексы

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) Осокин С.И.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-2	способность использовать результаты освоения дисциплин программы магистратуры
ПК-1	способность анализировать современное состояние проблем в предметной области биотехнических систем и технологий (включая биомедицинские и экологические задачи)
ПК-6	способность проектировать устройства, приборы, системы и комплексы биомедицинского и экологического назначения с учетом заданных требований

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

представления, лежащие в основе моделирования молекулярной динамики; возможности компьютерной реализации; базовые алгоритмы для нахождения межмолекулярных взаимодействий и численного интегрирования уравнений движения молекулярной системы; примеры постановок и использованных технологий при проведения вычислительных экспериментов с биоструктурами; примеры вычислительных экспериментов с белками; место и роль молекулярного моделирования биоструктур в биологии.

Должен уметь:

проводить расчеты для модельных молекулярных систем с использованием различных программных средств; проводить обработку результатов молекулярно-динамических расчетов.

Должен владеть:

методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования биоструктур.

Должен демонстрировать способность и готовность:

навыки использования вычислительных методов и уметь использовать эти методы в планировании и осуществлении вычислительных экспериментов.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.Б.1 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 12.04.04 "Биотехнические системы и технологии (Медико-биологические аппараты, системы и комплексы)" и относится к базовой (общепрофессиональной) части.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 часа(ов).

Контактная работа - 24 часа(ов), в том числе лекции - 6 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 84 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основы моделирования молекулярной динамики	2	2	4	0	14
2.	Тема 2. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды	2	2	2	0	14
3.	Тема 3. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами	2	2	4	0	16
4.	Тема 4. Программное обеспечение молекулярного моделирования биоструктур	2	0	2	0	14
4.2	Содержание дисциплины (модуля) Тема 1. Основы моделирования молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы?	2	0	4	0	16
6.	Тема 6. Аттестация					

Моделирование молекулярной динамики. Предмет курса. Краткая история численного моделирования молекулярной динамики. Вычислительный эксперимент, его роль и место в нанобиотехнологии. Пространственные и временные масштабы. Единицы измерения в "молекулярном мире". Характерные единицы массы, энергии, времени. О числе частиц в моделируемой молекулярной системе. Эффективный учет растворителя. Периодические граничные условия.

Тема 2. Алгоритмы учета термодинамических характеристик среды

Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия. Молекулярная система в виде совокупности взаимодействующих материальных частиц. Энергия молекулярной системы как сумма энергий валентных связей, валентных углов, торсионных углов, плоских групп, ван-дер-ваальсовых и кулоновских взаимодействий. Функциональный вид этих взаимодействий, то есть формулы, по которым вычисляется энергия взаимодействующих атомов, если известны их координаты, и таблицы параметров (значений коэффициентов, зависящих от типов атомов)

Тема 3. Технологии постановки и проведения вычислительных экспериментов с различными биомолекулярными системами

Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Радиус обрезания. Комбинационные правила. Экранирование кулоновского потенциала. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Оценка числа невалентных взаимодействий. Эффективные алгоритмы, использующие конечный радиус взаимодействия. Алгоритм Верле (= метод составления списков). Оценка его быстродействия.

Тема 4. Программное обеспечение молекулярного моделирования биоструктур

Моделирование биологических мембран. Описание технологи приготовления биологической мембраны, включающее приготовление фосфолипидного бислоя, его релаксацию, выращивания цилиндрической полости, пронизывающей бислоем, заключение каналаобразующего пептида в такой же цилиндр, совмещение двух подсистем, релаксацию образованной биомембраны и, наконец, получение продуктивной траектории. Освоение программного обеспечения для молекулярного моделирования биоструктур

Тема 5. Проведение НИР ?Моделирование молекулярной динамики гидратированной макромолекулярной системы?

Практическая работа : " методика проведения вычислительного эксперимента по моделированию молекулярной динамики"

Тема 6. Аттестация

Презентация результатов НИР

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Entrez cross-database search page - <http://www.ncbi.nlm.nih.gov>

Биологические банки и базы данных - <http://www.nsu.ru/education/i4biol/noframes/reviewdb.html>
лист программ для молекулярной динамики - <http://www.moldyn.ru/links.htm>
Портал биоинформационных ресурсов для геномики и протеомики - <http://www.expasy.org>
форум по молекулярной биологии - <http://www.molecularstation.com/ru/bioinformatics/biological-databases/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Основными видами самостоятельной учебной деятельности студентов являются:

- 1) предварительная подготовка к аудиторным занятиям, в том числе и к тем, на которых будет изучаться новый, незнакомый материал. Такая подготовка предполагает изучение учебной программы, установление связи с ранее полученными знаниями, выделение наиболее значимых и актуальных проблем, на изучении которых следует обратить особое внимание и др.;
- 2) самостоятельная работа при прослушивании лекций, осмысление учебной информации, сообщаемой преподавателем, ее обобщение и краткая запись, а также своевременная доработка конспектов лекций;
- 3) подбор, изучение, анализ и при необходимости - конспектирование рекомендованных источников по учебным дисциплинам;
- 4) выяснение наиболее сложных, непонятных вопросов и их уточнение во время консультаций;
- 5) подготовка к контрольным занятиям, зачетам и экзаменам;
- 6) выполнение специальных учебных заданий, предусмотренных учебной программой;
- 7) написание рефератов, контрольных, курсовых, квалификационных, дипломных работ и их защита;
- 8) выполнение собственных научных исследований, участие в научных исследованиях, проводимых в масштабе кафедры, факультета, института и университета в целом.

При подготовке к лабораторно-практическим занятиям студент должен:

1. Ознакомиться с планом занятий, программой, методическими указаниями или инструкцией проведения занятий;
2. Проработать конспект лекций и рекомендованную литературу.
3. При затруднениях сформулировать вопросы к преподавателю.
4. Подготовить ответы на вопросы, входящие в структуру содержания лабораторного занятия по каждой теме соответствующего раздела.

При подготовке к письменной работе необходимо:

- 1) Проработать конспект лекций.
- 2) При необходимости обратиться к источникам основной и дополнительной литературы, рекомендованной по учебной дисциплине.
- 3) Составить подробный план письменной работы.
- 4) При затруднениях сформулировать вопросы к преподавателю.

При подготовке к устному опросу студент должен освоить теоретический материал, включающий конспекты лекций и литературу по специальности.

При подготовке к зачету следует начать готовиться заблаговременно, не откладывая все на последний день. Осторожно относитесь к информации, найденной в интернете, однако и не пренебрегайте ей. После теоретических основ и актуальности предмета следует сделать акцент на изучении и запоминании проблематики дисциплины - ее основных спорных и дискуссионных вопросов. Как правило, преподаватель, принимающий зачет, желает услышать то, что он говорил на лекциях. Отвечая в соответствии с тем материалом, что давался на лекции, вы покажете, что внимательно слушали преподавателя.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 12.04.04 "Биотехнические системы и технологии" и магистерской программе "Медико-биологические аппараты, системы и комплексы".

*Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.1 Математическое моделирование биологических
процессов и систем*

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 12.04.04 - Биотехнические системы и технологии
Профиль подготовки: Медико-биологические аппараты, системы и комплексы
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Основная литература:

1. Экономико-математические методы и модели: Учебное пособие / Р.Ш. Хуснутдинов. - М.: НИЦ Инфра-М, 2013. - 224 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-16-005313-4, 500 экз. <http://znanium.com/bookread.php?book=363775>
2. Светлов, Н. М. Моделирование многоэтапного процесса принятия решений в сельскохозяйственной организации [Электронный ресурс] / Н. М. Светлов, В. Н. Сахарова, Н. А. Кубышина. - М.: ИНФРА-М, 2012. - 142 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=424512>
3. Моделирование эколого-экономических систем: Учебное пособие / М.С. Красс. - 2-е изд. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 272 с <http://znanium.com/bookread.php?book=398940>

Дополнительная литература:

1. Основы информатизации и математического моделирования экологических систем: Учебное пособие / В.П. Мешалкин, О.Б. Бутусов, А.Г. Гнаук. - М.: ИНФРА-М, 2010. - 357 с <http://znanium.com/bookread.php?book=184099>
2. Гетманчук, А. В. Экономико-математические методы и модели [Электронный ресурс] : Учебное пособие для бакалавров / А. В. Гетманчук, М. М. Ермилов. - М. : Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2013. - 188 с. - ISBN 978-5-394-01575-5. <http://znanium.com/bookread.php?book=415314>
3. Моделирование информационных ресурсов: теория и решение задач: учебное пособие / Г.Н. Исаев. - М.: Альфа-М: ИНФРА-М, 2010. - 224 с.: <http://znanium.com/bookread.php?book=193771>

*Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.1 Математическое моделирование биологических
процессов и систем*

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 12.04.04 - Биотехнические системы и технологии

Профиль подготовки: Медико-биологические аппараты, системы и комплексы

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.