

Дисципліна: «КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БІОПОЛІМЕРІВ»

ДВА.3.01.17 Дисципліна вільного вибору аспіранта

ВИКЛАДАЧ:

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

ЗАГАЛЬНЕ НАВАНТАЖЕННЯ: 3 кредити 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 нанокомпозитних 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 вміннь 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 ґрид-технологій, ґрид-мережі для досліджень в галузі молекулярної біології. Український національний ґрид: 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
<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. <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.	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 дослідника у галузі комп'ютерного моделювання.

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 ґрід-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	Семі-нари	СР	Модульн і контрольні роботи
ЗМ1: Структурна організація білків та супрамолекулярних комплексів. (1 кредит)					
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
ЗМ2: Комп'ютерні методи аналізу та моделювання структури білків. (1 кредит).					
4	Комп'ютерні бази даних послідовностей нуклеїнових кислот та білків (<i>GenBank</i> , <i>Swiss-Prot</i> та ін.) Банки даних геномних проектів. 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

ЗМЗ: Основи комп'ютерних ґрід-технологій. Віртуальна лабораторія MolDynGrid та її використання для моделювання молекулярної динаміки білків. (1 кредит).					
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
	ВСЬОГО	12	10	60	6

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. Відповіді неповні, або взагалі відсутні на деякі запитання.

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	A (відмінно)
81 – 90	добре		B (дуже добре)
71 – 80			C (добре)
66 – 70	задовільно		D (задовільно)
60 – 65			E (достатньо)
40 – 59	незадовільно	не зараховано	FX (незадовільно – з можливістю повторного складання)
1 – 39			F (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 та вимогам «Положення про систему забезпечення академічної доброчесності в Інституті молекулярної біології і генетики Національної академії наук України від 23 червня 2026 року»: <https://www.imbg.org.ua/docs/education/%D0%9F%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B6%D0%B5%D0%BD%D0%BD%D1%8F%20%D0%BF%D1%80%D0%BE%20%D0%B0%D0%BA%D0%B0%D0%B4%D0%BC%D1%96%D1%87%D0%BD%D1%83%20%D0%B4%D0%BE%D0%B1%D1%80%D0%BE%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BD%D1%96%D1%81%D1%82%D1%8>

ФОРМУВАННЯ ПРОГРАМНИХ КОМПЕТЕНТНОСТЕЙ

Загальні компетентності

- ЗК-1 Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу
- ЗК-2 Здатність використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій
- ЗК-3. Здатність самостійно проводити на сучасному рівні актуальні наукові дослідження
- ЗК-4. Здатність до пошуку, оброблення на аналізу інформації з різних джерел
- ЗК-5. Здатність генерувати нові ідеї (креативність)
- ЗК-6. Здатність працювати в міжнародному науковому просторі
- ЗК-7. Здатність до розробки та управління науковими проєктами
- ЗК-8. Здатність розвиватися, вчитися і самовдосконалюватись
- ЗК-9. Здатність до окреслення та розв'язання на сучасному рівні наукових проблем
- ЗК-10. Здатність діяти з соціальною відповідальністю та громадянською свідомістю

Спеціальні (фахові) компетентності

- СК-1 Здатність застосовувати отримані знання та уміння для вирішення проблем сучасної біології та біохімії
- СК-2 Здатність формулювати наукову проблему та знаходити шляхи її розв'язання, формуючи робочі гіпотези, переосмислювати наявні та створювати нові знання
- СК-3 Здатність визначати завдання біологічного дослідження та обирати адекватні методи для ефективного розв'язання конкретних науково-практичних задач у галузі біології та біохімії
- СК-4 Здатність самостійно проводити наукові дослідження, що ведуть до отримання нових цілісних знань
- СК-5 Здатність до адекватної інтерпретації даних, отриманих в результаті наукового дослідження, та порівняння фактів, виявлених у власних наукових дослідженнях, з сучасними концепціями, гіпотезами та теоріями
- СК-6 Поглиблене знання і розуміння у конкретній галузі біології
- СК-7 Здатність ефективно спілкуватися з широкою науковою спільнотою
- СК-8 Розуміння етичних аспектів наукової діяльності
- СК-9 Здатність розвивати особисте відчуття відповідальності за отримані в ході наукової діяльності результати
- СК-10 Здатність представляти результати власного дослідження широкому загалу фахівців та нефахівців; здатність працювати у команді

ПРОГРАМНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

- ПР1. Мати сучасні знання в біології: новітні концепції біології, знати сучасне методологічне та інструментальне забезпечення молекулярної біології, молекулярної генетики та біотехнології, інших суміжних предметних галузей знань
- ПР2. Вільно спілкуватися з науковою спільнотою та громадськістю в певній галузі наукової та/або професійної діяльності; представляти результати наукових досліджень у наукових публікаціях у фахових вітчизняних та міжнародних виданнях та на конференціях як державною, так і іноземною мовою
- ПР3. Знати сучасну фахову літературу у галузі дослідження: фундаментальні зарубіжні та вітчизняні праці, представників наукових шкіл
- ПР4. Критично аналізувати наукову літературу та вміти визначати мало досліджені та суперечливі питання; формулювати ідеї та гіпотези, спрямовані на розв'язання досліджуваної проблеми; визначати актуальність власного наукового дослідження, обирати адекватні методи

та підходи до його виконання, ініціювати, організовувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької діяльності

ПР5. Вміти творчо застосовувати фундаментальні біологічні знання для адекватної оцінки та розв'язання прикладних задач у галузі біотехнології, молекулярної біології, молекулярної генетики

ПР6. Уміння ініціювати наукові та інноваційні проекти в галузі біології та у суміжних галузях науки, які дають можливість переосмислити наявне та створити нове цілісне знання і розв'язувати важливі теоретичні та практичні проблеми біології з дотриманням норм академічної доброчесності з урахуванням соціальних, економічних, та правових аспектів; ініціативність та відповідальність під час їх реалізації

ПР7. Формування системного наукового світогляду, методологічної культури науковця, креативного мислення, філософського осмислення шляхів формулювання нових ідей, історичного досвіду розв'язання проблем в галузі дослідницько-інноваційної діяльності, професійної наукової етики

ПРН8. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу великого обсягу інформації, використовувати спеціалізовані бази даних та інформаційні системи

ПР9. Підходити до постановки та виконання експериментального завдання з огляду на сучасні уявлення про молекулярні механізми біологічних процесів

ПР10. Вміти залучати в науково-дослідну роботу як традиційні, так і новітні біотехнологічні методи

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Сиволоб А.В. Молекулярна біологія. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2008.- 384 с. http://www.biol.univ.kiev.ua/public/pidruch/MolBiol_sivolob.pdf
2. Mazumder, Sharmi, Mohammad Hossein Golbabaei, and Ning Zhang. "Advances in computational modeling and machine learning of cellulosic biopolymers: A comprehensive review." *Biomimetics* 10.12 (2025): 802.
3. Aldwairi, T., Tamer/Al-Mubaid Aldwairi (Hisha), & Eulenstein, O. (2025). *Bioinformatics and Computational Biology*// 17th International Conference, BICOB 2025, San Francisco, CA, USA, March 17, 2025, Proceedings.
4. Wang, X. Q., Jin, Z., Ravichandran, D., & Gu, G. X. (2025). Artificial intelligence and multiscale modeling for sustainable biopolymers and bioinspired materials. *Advanced Materials*, 37(22), 2416901.
5. Lesiuk, A., & Kornelyuk, O. (2026). Molecular dynamics insights into the interaction of the cytokine endothelial monocyte-activating polypeptide II with titanium dioxide nanoparticles. *Journal of Molecular Liquids*, 129758.
6. Lozhko, D., Kolomiets, L., Zhukova, L., Taube, M., Kozak, M., Dadlez, M., ... & Zhukov, I. (2025). Solution 3D structure and conformational flexibility of the endothelial monocyte activating polypeptide II (EMAP II) revealed by NMR spectroscopy and molecular dynamics simulations. *Journal of Structural Biology*, 108280.
7. Wang, L., Shuzan, N., & Zheng, J. (2026). Computational modeling of regulated protein conformational transitions. *Current Opinion in Structural Biology*, 100, 103337.
8. Harvey Lodish, Arnold Berk, Chris A Kaiser, Monty Krieger, Anthony Bretscher, Hidde

- Ploegh, Angelika Amon, Kelsey C Martin. *Molecular Cell Biology* (8th edition). W.H. Freeman, 2016. 1274 pages.
9. Bernard R. Glick, Cheryl L. Patten *Molecular Biotechnology: Principles and Applications of Recombinant DNA*, 6th Edition. Wiley, 2022. 896 pages
 10. Subrata Pal. *Fundamentals of Molecular Structural Biology*. Academic Press, 2019. 518 pages.
 11. Savytskyi, O. V., Sirmans, T. N., Coban, M. A., Weber, C. A., Murray, M. E., & Caulfield, T. R. (2023). Computational modeling and molecular mapping of serine protease inhibitor family A5 (SERPINA5) structure, associated with tau expression and Alzheimer's disease. *Biophysical Journal*, 122(3), 471a.
 12. Gupta, Y., Savytskyi, O.V., Coban, M., Venugopal, A., Pleqi, V., Weber, C.A., Chitale, R., Durvasula, R., Hopkins, C., Kempaiah, P. and Caulfield, T.R., 2023. Protein structure-based in-silico approaches to drug discovery: Guide to COVID-19 therapeutics. *Molecular Aspects of Medicine*, 91, p.101151.
 13. Kravchuk, V. O., Savytskyi, O. V., Odynets, K. O., Mykuliak, V. V., & Kornelyuk, A. I. (2017). Computational modeling and molecular dynamics simulations of mammalian cytoplasmic tyrosyl-tRNA synthetase and its complexes with substrates. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 35(13), 2772-2788.

Рекомендовані електронні ресурси

1. WeNMR (<http://www.wenmr.eu>)
2. ViroLab (<http://www.virolab.org>).