


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
биофизики и биотехнологии

 В.Г. Артюхов
29.05.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б.1.В.05 Компьютерные исследования и моделирование биологических систем и процессов

- 1. Шифр и наименование направления:**
06.03.01 Биология
- 2. Профиль подготовки:**
Биофизика
- 3. Квалификация (степень) выпускника:**
бакалавр
- 4. Форма обучения:**
очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:**
кафедра биофизики и биотехнологии
- 6. Составители программы:**
Кондратьев М.С., к.ф.-м.н.;
Калаева Елена Анатольевна, канд. биол. наук, доц.
- 7. Рекомендована:** : НМС медико-биологического факультета, протокол № 4 от 29.05.2023 г.
- 8. Учебный год:** 2025/2026 **Семестр(ы):** 6

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: формирование базовых знаний и представлений о методах компьютерных исследований и моделирования биопроцессов.

Задачи:

- ознакомиться с различными типами математических и компьютерных моделей,
- определить сферы их применения,
- выработать практические навыки построения различных типов моделей биологических процессов.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина относится к блоку Дисциплины (Б.1), часть, формируемая участниками образовательных отношений (Б.1.В).

Студенты должны иметь базовые знания по курсам "Математика", "Информатика", "Биологическая статистика и основы научно-исследовательской деятельности", "Биохимия", "Молекулярная биология", "Генетика".

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способен проводить сбор, анализ и обработку научно-технической (научной) информации, необходимой для решения профессиональных задач, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.2	Проводит первичный анализ и обобщение отечественного и международного опыта в соответствующей области исследований под руководством специалиста более высокой квалификации	Знать: современное состояние проблемы в области исследований Уметь: осуществлять сбор, первичный анализ и обобщение информации по проблеме исследования Владеть: навыками поиска информации в сети Интернет, ее верификации, систематизации и критического анализа
ПК-5	Способен применять современные представления об основах биотехнологии, биомедицины, нанобиотехнологии, компьютерного моделирования в научно-исследовательской деятельности	ПК-5.1	Принимает участие в разработке планов и протоколов биотехнологических, биомедицинских, нанобиотехнологических, компьютерных исследований биологических систем и процессов	Знать: теоретические основы планирования исследования. Уметь: планировать отдельные этапы исследования Владеть: навыками разработки протокола исследования
		ПК-5.2	Проводит отдельные этапы научно-исследовательских работ в области биотехнологии, биомедицины, нанобиотехнологии, компьютерного моделирования биологических систем и процессов	Знать: теоретические основы, область применения и ограничения методов компьютерного моделирования Уметь: разрабатывать простейшие модели биологических процессов и явлений. Владеть: навыками работы в специализированных пакетах программ, применяемых для моделирования биологических процессов и явлений

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час) — 4 ЗЕТ / 144 час

Форма промежуточной аттестации экзамен, курсовая работа

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость	
	Всего	По семестрам
		6 семестр
Аудиторные занятия	64	64
в том числе:		
лекции	32	32
практические	-	-
лабораторные	32	32
Самостоятельная работа	44	44
Форма промежуточной аттестации	36	36
Экзамен		
Курсовая работа		
Итого:	144	144

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК*
1. Лекции			
1.1	Введение в курс «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов»	Понятие модели. Объект, цели и методы моделирования. Модели в разных науках. Компьютерные и математические модели. История первых моделей в биологии. Современная классификация моделей биологических процессов. Регрессионные, имитационные, качественные модели. Принципы имитационного моделирования и примеры моделей. Специфика моделирования живых систем.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.2	Модели, биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением первого порядка	Модели, приводящие к одному дифференциальному уравнению. Понятие решения одного автономного дифференциального уравнения. Стационарное состояние (состояние равновесия). Устойчивость состояния равновесия. Методы оценки устойчивости. Решение линейного дифференциального уравнения. Примеры: экспоненциальный рост, логистический рост.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.3	Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений	Фазовая плоскость. Фазовый портрет. Метод изоклин. Главные изоклины. Устойчивость стационарного состояния. Линейные системы. Типы особых точек: узел, седло, фокус, центр. Пример: химические реакции первого порядка.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554

1.4	Проблема быстрых и медленных переменных. Теорема Тихонова. Типы бифуркаций. Катастрофы.	Метод квазистационарных состояний. Теорема Тихонова. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Бифуркации динамических систем. Типы бифуркаций. Бифуркационные диаграммы и фазопараметрические портреты. Катастрофы.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.5	Мультистационарные системы	Триггер. Примеры систем с двумя устойчивыми стационарными состояниями. Конкуренция. Силовое и параметрическое переключение триггера. Эволюция. Отбор одного из двух или нескольких равноправных видов. Генетический триггер Жакоба и Моно.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.6	Колебания в биологических системах	Понятие автоколебаний. Изображение автоколебательной системы на фазовой плоскости. Предельные циклы. Условия существования предельных циклов. Рождение предельного цикла. Бифуркация Андронова-Хопфа. Автокатализ. Типы обратной связи. Примеры. Брюсселятор. Гликолиз. Модели клеточного цикла.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.7	Динамический хаос	Основные понятия теории динамических систем. Предельные множества. Аттракторы. Странные аттракторы. Динамический хаос. Диссипативные системы. Устойчивость хаотических решений. Размерность странных аттракторов.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.8	Введение в биоинформатику	Пакеты компьютерных программ и базы данных	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.9	Выравнивание последовательностей	Цели и типы выравнивания. Парное, множественное, локальное и глобальное выравнивания.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.10	Методы биоинформационного анализа.	Матрицы замен. Алгоритм динамического программирования. Алгоритмы глобального и локального выравнивания.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.11	Методы предсказания белковых структур	Стратегии предсказания генов. Стратегии предсказания белков.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.12	Гомология, филогения и эволюционные деревья.	Гомология и подобие. Филогения и родство.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.13	Биоинформатика в медицине.	Диагностика болезни и риска заболевания. Индивидуально-специфическое лечение. Идентификация мишеней для лекарственных средств. Генная терапия.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
1.14	Модели процессов на молекулярном уровне.	Физические основы метода молекулярной динамики. Молекулярный докинг.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554

	Молекулярная динамика биомолекул	Крупнозернистые модели	
1.15	Модели процессов в субклеточных наносистемах	Кинетическое и прямое компьютерное моделирование. Роль сложного интерьера клетки в кинетике наблюдаемых процессов	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
2. Практические занятия			
не предусмотрены			
3. Лабораторные работы			
3.1	Введение в курс «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов»	Примеры моделей. Регрессионные модели. Специфика моделирования живых систем.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.2	Модели, биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением первого порядка	Устойчивость состояния равновесия. Методы оценки устойчивости.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.3	Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений	Типы особых точек: узел, седло, фокус, центр	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.4	Проблема быстрых и медленных переменных. Теорема Тихонова. Типы бифуркаций. Катастрофы.	Бифуркационные диаграммы и фазопараметрические портреты	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.5	Мультистационарные системы	Генетический триггер Жакоба и Моно.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.6	Колебания в биологических системах	Брюсселятор. Гликолиз. Модели клеточного цикла.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.7	Динамический хаос	Диссипативные системы.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.8	Введение в биоинформатику	Пакеты компьютерных программ и базы данных	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.9	Выравнивание последовательностей	Попарное, множественное, локальное и глобальное выравнивания.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.10	Методы биоинформационного анализа.	Алгоритмы глобального и локального выравнивания.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.11	Методы предсказания белковых структур	Принципы моделирования белковых молекул	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.12	Гомология, филогения и эволюционные деревья.	Построение филогенетических деревьев. Кластеризация	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.13	Биоинформатика в медицине	Идентификация мишеней для лекарственных средств	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554
3.14	Модели процессов на молекулярном уровне. Молекулярная	Молекулярный докинг	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554

	динамика биомакромолекул		
3.15	Модели процессов в субклеточных наносистемах	Модель электронного транспорта и сопряженных процессов в фотосинтетической мембране.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1.	Введение в курс «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов»	2	–	2	2	6
2.	Модели, биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением первого порядка	2	–	2	3	7
3.	Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений	2	–	2	3	7
4.	Проблема быстрых и медленных переменных. Теорема Тихонова. Типы бифуркаций. Катастрофы.	2	–	2	3	7
5.	Мультистационарные системы	2	–	2	3	7
6.	Колебания в биологических системах	2	–	2	3	7
7.	Динамический хаос	2	–	2	3	7
8.	Введение в биоинформатику	2	–	2	3	7
9.	Выравнивание последовательностей	2	–	4	3	9
10.	Методы биоинформационного анализа.	4	–	2	3	9
11.	Методы предсказания белковых структур	2	–	2	3	7
12.	Гомология, филогения и эволюционные деревья.	2	–	2	3	7
13.	Биоинформатика в медицине.	2	–	2	3	7
14.	Модели процессов на молекулярном уровне. Молекулярная динамика биомакромолекул	2	–	2	3	7
15.	Модели процессов в субклеточных наносистемах	2	–	2	3	7
	Контроль					36
	Итого:	32	—	32	44	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение содержания дисциплины осуществляется с использованием дистанционных образовательных технологий (ДОТ) – электронного учебного курса «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов», расположенного по адресу: <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554> на портале «Электронный университет ВГУ». Перед началом учебных занятий обучающийся должен:

1. Проверить наличие доступа к курсу. В случае выявления проблем своевременно обратиться к преподавателю или в службу технической поддержки.

2. Изучить интерфейс курса, знать способы взаимодействия с преподавателем в рамках ЭУК: сообщение на форуме, отправка личного сообщения, чат.

3. Ознакомиться с целью и задачами дисциплины, перечнем формируемых компетенций и результатов обучения, программой дисциплины, календарным планом,

траекторией освоения дисциплины, комплексом вопросов и требований для промежуточной аттестации.

4. Ознакомиться с перечнем основной и дополнительной литературы, а также списком электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины. Получить доступ к электронным библиотечным системам, на которые оформлена подписка ФГБОУ ВО «ВГУ».

Методические указания по проработке конспектов лекций, материалов учебника

Внимательно ознакомьтесь с программой, тематическим и календарным планами, с вопросами к аттестации. Изучая в эти документы, постарайтесь вспомнить соответствующий учебный материал общих дисциплин – химии, биологии, экологии и др. Выпишите в рабочую тетрадь те понятия, идеи и проблемы, которые вам незнакомы, встретились при изучении этих документов впервые.

1. Изучайте учебный материал последовательно, соответственно рабочему плану. В случае необходимости возвращайтесь к учебникам по общим дисциплинам, обращайтесь к рекомендованной учебной литературе.

2. При изучении каждой темы выписывайте новые понятия и термины в рабочую тетрадь.

3. Используя глоссарий, учебники, энциклопедические словари, Интернет-ресурсы и другие информационные источники, раскройте их смысл.

4. Внимательно ознакомьтесь с контрольными вопросами. Постарайтесь на них ответить. В случае затруднений вновь вернитесь к теоретическому материалу и постарайтесь вникнуть в него более глубоко. При необходимости обращайтесь к рекомендованной для изучения учебной литературе.

5. Из перечня тестов выберите те, которые относятся к изучаемой теме. Выполните их. Если Вы не можете ответить на тестовый вопрос, вновь обратитесь к теоретическому материалу.

6. Вычлните концептуальные идеи, заложенные в учебном материале, раскройте их смысл, обоснуйте и выпишите в рабочую тетрадь.

7. Составьте по теме опорный конспект в виде плана-ответа на вопросы, выносимые на аттестацию.

Методические указания по написанию курсовых работ (рефератов)

Из предлагаемого перечня тем выберите наиболее интересную для себя. Подберите литературу, ознакомьтесь с ней, обдумайте информацию, составьте план и постарайтесь его раскрыть. Курсовая работа (реферат) состоит из нескольких взаимосвязанных частей. «Введение» раскрывает актуальность темы, «Основная часть» раскрывает ее содержание, в «Заключении» делается резюме с обязательным изложением своего мнения по данному проблемному вопросу. Список использованной литературы оформляется по ГОСТу. Работа должна иметь правильно оформленный титульный лист. Важнейшее требование к работе - самостоятельность выполнения. Если в процессе рецензирования с помощью системы Антиплагиат обнаружится более 40 % заимствованного текста, то работа не будет зачтена.

Курсовая работа (реферат) представляет собой самостоятельную исследовательскую работу, в которой автор раскрывает суть исследуемой проблемы, расширяет и углубляет свои теоретические знания, учится анализировать, систематизировать, обобщать научные теории и делать выводы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее. Работа над курсовой работой (рефератом) способствует раскрытию исследовательского потенциала студента, развитию способности к творческому поиску, сотрудничеству, самореализации.

Курсовая работа (реферат) – это краткое систематическое и последовательное изложение какого-либо вопроса или научного труда. Он является одной из форм интерпретации исходного текста или нескольких источников, поэтому курсовая работа (реферат), в отличие от конспекта, представляет собой новый, авторский текст. Новизна в

данном случае подразумевает новое изложение, систематизацию материала, особую авторскую позицию при сопоставлении различных точек зрения. Таким образом, реферирование предполагает изложение какого-либо вопроса на основе классификации, обобщения, анализа и синтеза одного или нескольких источников.

Курсовой работе (реферату) должны быть присущи: целостность (содержательно-тематическая, стилевая, языковая), связность (логическая и формально-языковая), структурная упорядоченность (наличие введения, основной части и заключения, их оптимальное соотношение), завершенность (смысловая и жанрово-композиционная).

Структура и содержание курсовой работы (реферата)

Объем курсовой работы (реферата) должен быть не менее 12 страниц формата А4.

Тема может носить межпредметный, внутрипредметный и интегративный характер; быть в рамках программы дисциплины или расширять ее содержание (рассмотрение истории проблемы, новых теорий, новых аспектов проблемы, новых источников).

Курсовая работа (реферат) любого типа, как правило, имеет следующую структуру:

- титульный лист,
- содержание,
- введение,
- основная часть,
- заключение,
- список литературы,
- приложения (если есть).

Требования к введению

Введение должно включать в себя краткое обоснование *актуальности* темы, в которой необходимо показать, почему данный вопрос может представлять научный интерес, в чем заключается его практическое значение. Объем введения обычно составляет 1-1,5 страницы текста.

Требования к основной части курсовой работы (реферата)

Основная часть содержит материал, который отобран для раскрытия ключевых положений выбранной темы. Содержание основной части должно быть логичным, изложение материала носит проблемно-тематический характер. Обязательными являются ссылки на авторов, чьи позиции, мнения использованы в курсовой работе (реферате).

Требования к заключению

Заключительная часть состоит из подведения итогов выполненной работы, краткого и четкого изложения выводов. Объем заключения составляет 1-1,5 страницы.

Требования к списку литературы

В подготовке курсовой работы (реферата) необходимо использовать материалы современных изданий (не старше 5-10 лет в зависимости от темы работы). Источники должны быть перечислены в алфавитной последовательности. Основное требование к списку литературы – достоверность, поэтому описание составляется непосредственно по документу. В общий список литературы включают все документы, используемые при написании научной работы, независимо от их носителя, включая электронные издания и ресурсы Интернет.

Приложения

После списка литературы могут быть помещены различные приложения (таблицы, графики, диаграммы, иллюстрации и т. п.)

Методические указания по подготовке к лабораторным занятиям

1. Ознакомьтесь с планом занятия и списком рекомендованной к нему литературы.
2. Изучите рекомендованную литературу. Начинайте с оглавления. Выберите в нем темы, непосредственно относящиеся к проблеме занятия. Изучите их.
3. Обдумайте ответы на вопросы. Используя дополнительную литературу, а также другие информационные источники, найдите примеры, подтверждающие варианты ответов.

Методические указания для подготовки к аттестации

1. Внимательно ознакомьтесь с вопросами. Постарайтесь на них ответить. В случае затруднений вновь вернитесь к теоретическому материалу и постарайтесь вникнуть в него более глубоко. При необходимости обращайтесь к рекомендованной для изучения учебной литературе.

2. Из перечня тестов выберите те, которые относятся к изучаемой теме. Выполните их. Если не можете ответить на тестовый вопрос, вновь обратитесь к теоретическому материалу.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Советов Б. Я. Моделирование систем : учебник для бакалавров / Б.Я. Советов, С. А. Яковлев. — 7-е изд. — Москва : Юрайт, 2012 .— 342 с.
2.	Советов Б. Я. Моделирование систем. Практикум : учебное пособие для бакалавров / Б.Я. Советов, С. А. Яковлев. — Москва : Юрайт, 2012 .— 294 с.
3.	Петров А.В. Моделирование процессов и систем / А.В. Петров. - М.: Лань, 2015. - 288 с. // Издательство "Лань" : электронно-библиотечная система. - URL : http://e.lanbook.com

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Ризниченко Г.Ю. Биофизическая динамика продукционных процессов / Г.Ю.Ризниченко, А.Б. Рубин .— М. ; Ижевск : Ин-т компьютер. исследований, 2004. — 463 с.
5.	Ризниченко Г.Ю. Математические модели биологических продукционных процессов : Учеб. пособие / Г.Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин .— М. : Изд-во МГУ, 1993. - 299 с.
6.	Динамические модели процессов в клетках и субклеточных наноструктурах / под ред. Г.Ю. Ризниченко, А.Б. Рубина. — М. ; Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика : Ин-т компьютерных исследований, 2010 .— 447 с.
7.	Семенов М. Г. Введение в математическое моделирование / М.Г. Семенов. — М. : СОЛОН-Р, 2002 .— 111 с.
8.	Стефанов В. Е. Введение в квантовую биологию: методы компьютерного моделирования в анализе биомолекулярных систем : учебное пособие / В.Е. Стефанов, А.А. Тулуб ; С.-Петербург. гос. ун-т .— СПб : Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2006 .— 72 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет):

№ п/п	Ресурс
1.	www.lib.vsu.ru – ЗНБ ВГУ
2.	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Pubmed - База научных данных в области биомедицинских наук. (MEDLINE и др. биомедицинские издания). Поиск статей по именам и ключевым словам. Определение индекса цитирования и импакт-фактора. Текстовая информация и литературные ссылки. Работа с научными журналами.
3.	www.chem.qmul.ac.uk/iubmb - Биохимическая классификация и номенклатура ферментов. Свободный доступ на сайте Международного союза биохимии и молекулярной биологии.
4.	www.swissprot.com – свободный доступ к международной базе данных по первичным и 3D структурам ферментов
5.	http://www.omim.org/ (Online Mendelian Inheritance in Man) – каталог генов человека и генетических нарушений. Таксономические базы данных (NCBI).
6.	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/refseq/ Базы данных нуклеотидных последовательностей (Genetic sequence databank GenBank), Reference Sequence databank, первичные последовательности DNA, mRNA и белков основных исследованных организмов.
7.	http://www.pdb.org/ – банк данных по пространственным структурам белков (более 70 тыс. структур)
8.	http://www.uniprot.org - Центральное хранилище данных о последовательностях и функциях белков – база данных Универсального белкового ресурса (Universal Protein Resource, UniProt,)
9.	http://www.library.biophys.msu.ru/LectMB/ - курс лекций Г.Ю. Ризниченко по математическим моделям в биологии
10.	Ризниченко, Г.Ю. Биофизическая динамика продукционных процессов / Г.Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин — Москва Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2004 .— 464 с. — <URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=137176 >.
11.	ЭУК «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов» на платформе

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Советов Б. Я. <i>Моделирование систем. Практикум : учебное пособие для бакалавров / Б.Я. Советов, С. А. Яковлев. — Москва : Юрайт, 2012. — 294 с.</i>
2	http://www.library.biophys.msu.ru/LectMB/ - курс лекций Г.Ю. Ризниченко по математическим моделям в биологии

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

При реализации дисциплины используются элементы электронного обучения и дистанционные образовательные технологии.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

394018, г. Воронеж, площадь Университетская, д. 1, пом. I, Учебный корпус №1 ауд. 59.	Учебная аудитория	Ноутбук Asus X55A/X55A, проектор Sanyo, специализированная мебель, экран для проектора
394018, г. Воронеж, площадь Университетская, д. 1, пом. I, Учебный корпус №1 ауд. 67.	Дисплейный класс	Компьютеры Celeron, Pentium, проектор Sanyo, экран для проектора, специализированная мебель

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Введение в курс «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов»	ПК-1 ПК-5	ПК-1.2 ПК-5.1 ПК-5.2	Тестовые задания
2.	Модели, биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением первого порядка			
3.	Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений			
4.	Проблема быстрых и медленных переменных. Теорема Тихонова. Типы бифуркаций. Катастрофы.			
5.	Мультистационарные системы			
6.	Колебания в биологических системах			
7.	Динамический хаос			

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
8.	Введение в биоинформатику			Курсовая работа
9.	Выравнивание последовательностей			
10.	Методы биоинформационного анализа.			
11.	Методы предсказания белковых структур			
12.	Гомология, филогения и эволюционные деревья.			
13.	Биоинформатика в медицине.			
14.	Модели процессов на молекулярном уровне. Молекулярная динамика биомолекул			
15.	Модели процессов в субклеточных наносистемах			
Промежуточная аттестация форма контроля – экзамен				Вопросы к экзамену

20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1. Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Тестовые задания

1. При изучении объекта реальной действительности можно создать:

- а) одну-единственную модель.
- б) несколько различных видов моделей, каждая из которых отражает те или иные существенные признаки объекта;
- в) одну модель, отражающую совокупность признаков объекта;
- г) точную копию объекта во всех проявлениях его свойств и поведения;

2. Модель — это:

- а) материальный или абстрактный заменитель объекта, отражающий его пространственно-временные характеристики;
- б) материальный или абстрактный заменитель объекта, отражающий его существенные характеристики;
- в) описание изучаемого объекта средствами изобразительного искусства;
- г) информация о несущественных свойствах объекта.

3. Любая математическая модель должна (в рамках рассматриваемых гипотез моделирования) быть абсолютно:

- а) точной;
- б) адекватной;
- в) идеальной;
- г) совершенной.

4. Моделирование — это:

- а) процесс замены реального объекта (процесса, явления) моделью, отражающей его существенные признаки с точки зрения достижения конкретной цели;
- б) процесс неформальной постановки конкретной задачи;
- в) процесс замены реального объекта (процесса, явления) другим материальным или идеальным объектом;
- г) процесс выявления существенных признаков рассматриваемого объекта.

5. Процесс построения модели, как правило, предполагает:
- описание всех свойств исследуемого объекта;
 - выделение наиболее существенных с точки зрения решаемой задачи свойств объекта;
 - выделение свойств объекта безотносительно к целям решаемой задачи;
 - описание всех пространственно-временных характеристик изучаемого объекта;
6. Математическая модель объекта — это:
- описание в виде схемы внутренней структуры изучаемого объекта;
 - совокупность данных, содержащих информацию о количественных характеристиках объекта и его поведения в виде таблицы;
 - совокупность записанных на языке математики формул, отражающих те или иные свойства объекта-оригинала или его поведение;
 - последовательность электрических сигналов.
7. Укажите ЛОЖНОЕ утверждение:
- “Строгих правил построения любой модели сформулировать невозможно”;
 - “Никакая модель не может заменить само явление, но при решении конкретной задачи она может оказаться очень полезным инструментом”;
 - “Совершенно неважно, какие объекты выбираются в качестве моделирующих — главное, чтобы с их помощью можно было бы отразить наиболее существенные черты, признаки изучаемого объекта”;
 - “Модель содержит столько же информации, сколько и моделируемый объект”;
8. Натурное моделирование - это:
- моделирование, при котором в модели узнается моделируемый объект, то есть натурная модель всегда имеет визуальную схожесть с объектом-оригиналом;
 - создание математических формул, описывающих форму или поведение объекта-оригинала;
 - моделирование, при котором в модели узнается какой-либо отдельный признак объекта-оригинала;
 - совокупность данных, содержащих текстовую информацию об объекте-оригинале;
9. Табличная информационная модель представляет собой:
- набор графиков, рисунков, чертежей, схем, диаграмм;
 - описание иерархической структуры строения моделируемого объекта;
 - описание объектов (или их свойств) в виде совокупности значений, размещаемых в таблице;
 - систему математических формул;
10. В биологии классификация представителей животного мира представляет собой:
- иерархическую модель;
 - табличную модель;
 - графическую модель;
 - натурную модель.
11. Целями моделирования являются:
- прогнозирование поведения системы;
 - управление системой или проектирование системы;
 - статистическая обработка результатов исследования;
 - синтез новых систем на основе уже существующих.
12. Модели биологических процессов должны быть:
- статическими;
 - динамическими;
 - универсальными;
 - специфическими.
13. Модели биологических процессов должны быть:
- детерминированными;
 - стохастическими (вероятностными);
 - универсальными;
 - специфическими.
14. Требования, предъявляемые к модели:
- полнота описания;
 - гибкость модели;
 - блочность структуры;

г) все ответы верны.

15. Принципы моделирования:

- а) адекватность;
- б) экономность;
- в) осуществимость;
- г) все ответы верны.

16. Виды компьютерных моделей:

- а) имитационные;
- б) ситуационные;
- в) долговременные;
- г) моментальные.

17. Недостатки моделирования:

- а) может предсказать явление, но не доказать его существование;
- б) подходит для ограниченного круга объектов;
- в) не дает объяснения полученных результатов;
- г) не имеет ничего общего с действительностью.

18. Биологические процессы обычно описывают:

- а) линейными уравнениями;
- б) дифференциальными уравнениями;
- в) квадратными уравнениями;
- г) интегральными уравнениями.

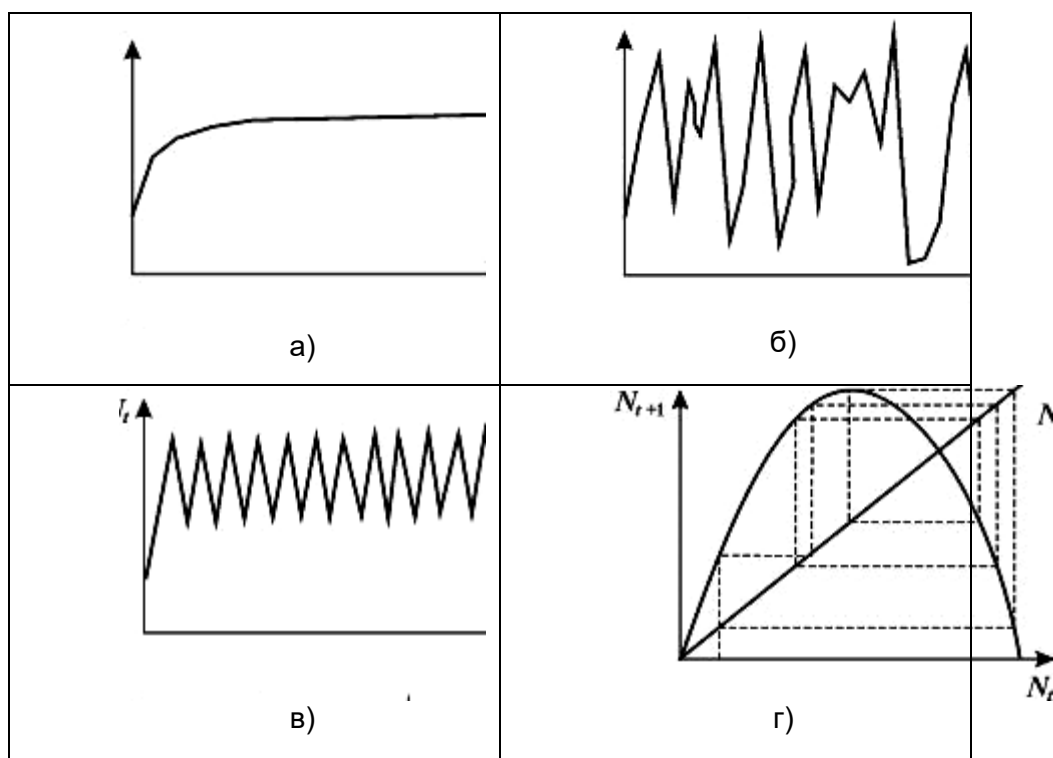
19. Стационарное состояние называется неустойчивым, если:

- а) малые отклонения со временем увеличиваются;
- б) малые отклонения со временем не изменяются;
- в) малые отклонения со временем затухают;
- г) малые отклонения в системе не возникают ни при каких условиях.

20. Если система автономная, то правая часть уравнений не зависит явно от:

- а) времени;
- б) системы координат;
- в) количества независимых переменных;
- г) размерности фазового пространства.

21. Лестница Ламарея изображена на диаграмме:



22. Стационарное состояние – это:

- а) точка пересечения интегральных кривых;
б) точка равновесия, где $dx/dy=0$;
в) точка, где независимая переменная $x=0$;
г) все ответы верные.
23. Состояние равновесия устойчиво, если:
а) малые отклонения не выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
б) малые отклонения выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
в) малые отклонения со временем затухают;
г) малые отклонения со временем усиливаются.
24. Состояние равновесия неустойчиво, если:
а) малые отклонения не выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
б) малые отклонения выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
в) малые отклонения со временем затухают;
г) малые отклонения со временем усиливаются.
25. Аттрактор – это:
а) множество, к которому во времени стремится изображающая точка;
б) множество, за границы которого изображающая точка не выходит;
в) граница раздела бассейнов устойчивого и неустойчивого равновесия;
г) множество, от которого во времени удаляется изображающая точка.
26. Метод анализа устойчивости стационарного состояния разработал:
а) Ляпунов;
б) Тихонов;
в) Ресслер;
г) Лоренц.
27. Модель Мальтуса описывает:
а) линейный рост численности популяции;
б) ограниченный рост численности популяции;
в) экспоненциальный рост численности популяции;
г) убыль численности популяции.
28. Модель Ферхюльста описывает:
а) линейный рост численности популяции;
б) ограниченный рост численности популяции;
в) экспоненциальный рост численности популяции;
г) убыль численности популяции.
29. Лестница Ламарея позволяет определить:
а) минимальную критическую численность популяции;
б) максимальную критическую численность популяции;
в) изменение численности популяции за определенный промежуток времени;
г) динамику популяционных волн.
30. Матричные модели численности популяций позволяют учитывать:
а) половую структуру популяции;
б) сезонную структуру популяции;
в) возрастную структуру популяции;
г) поведенческие особенности популяций одного вида.
31. Какие из перечисленных особых точек не могут быть аттракторами?
а) Узел;
б) Центр;
в) Фокус;
г) Седло.
32. Фазовый портрет системы – это:
а) совокупность фазовых траекторий;
б) совокупность изображающих точек;
в) совокупность аттракторов;
г) совокупность особых точек.
33. Изоклина – это:
а) линии, перпендикулярные интегральным кривым;
б) линии, параллельные интегральным кривым;

- в) параллельные линии, пересекающие интегральные кривые под определенным углом,
- г) границы притягивающих множеств.

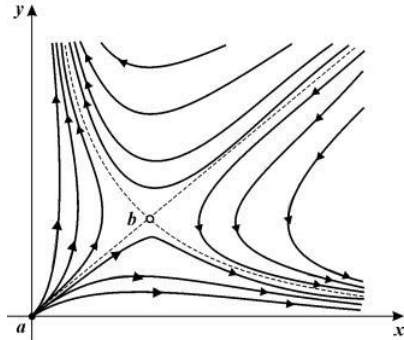
34. Точка пересечения главных изоклин соответствует:

- а) стационарному состоянию системы;
- б) исходному состоянию системы;
- в) конечному состоянию системы;
- г) состоянию покоя системы.

35. Устойчивой или неустойчивой особой точкой может быть:

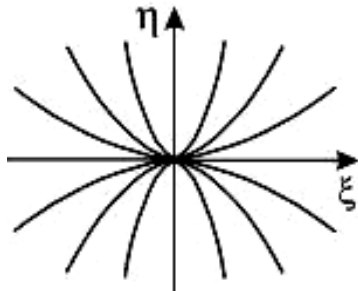
- а) Узел;
- б) Центр;
- в) Фокус;
- г) Седло.

36. На рисунке изображена особая точка типа:



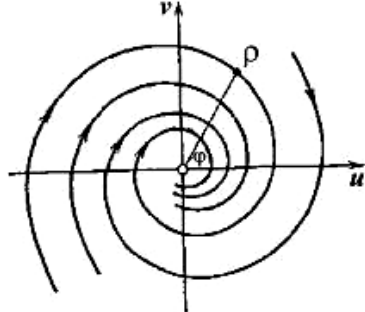
- а) узел;
- б) центр;
- в) седло;
- г) фокус.

37. На рисунке изображена особая точка типа:



- а) узел;
- б) центр;
- в) седло;
- г) фокус.

38. На рисунке изображена особая точка типа:



- а) узел;
- б) центр;
- в) седло;
- г) фокус.

39. Только устойчивой особой точкой может быть:

- а) Узел;
- б) Центр;

в) Фокус;

г) Седло.

40. Только неустойчивой особой точкой может быть:

а) Узел;

б) Центр;

в) Фокус;

г) Седло.

41. Модель Лотки используется для анализа:

а) кинетики химических реакций;

б) динамики численности популяций;

в) автоколебательных систем;

г) хаотического поведения систем.

42. Модель Вольтера используется для анализа:

а) кинетики химических реакций;

б) динамики численности популяций («хищник - жертва»);

в) автоколебательных систем;

г) хаотического поведения систем.

43. Благодаря учету иерархии времен, исходную систему из нескольких дифференциальных уравнений удается свести:

а) к одному дифференциальному уравнению для переменной y ;

б) к системе двух дифференциальных уравнений;

в) к единственному решению;

г) к линейному уравнению.

44. Редукцию системы уравнений позволяет провести:

а) разделение переменных на быстрые, средние и медленные;

б) линеаризация уравнений;

в) нахождение особой точки;

г) логарифмирование.

45. Дифференциальное уравнение, содержащее быструю переменную, можно приравнять к 0, потому что:

а) быстрая переменная быстро достигает максимума;

б) быстрая переменная быстро достигает минимума;

в) быстрая переменная быстро выходит в стационарный режим;

г) практически не изменяется за время наблюдения.

46. Дифференциальное уравнение, содержащее медленную переменную, можно приравнять к константе, потому что:

а) медленная переменная медленно достигает максимума;

б) медленная переменная медленно достигает минимума;

в) медленная переменная медленно выходит в стационарный режим;

г) практически не изменяется за время наблюдения.

47. Примером модели с редукцией системы является:

а) брюсселятор;

б) модель автоколебаний;

в) модель ферментативного катализа Михаэлиса-Ментен;

г) модель Вольтерры «хищник-жертва».

48. Математически строгое обоснование применения метода квазистационарных концентраций (редукции системы в соответствии с иерархией времен) и формулировка условий его применимости дана в работе:

а) Коши;

б) Ляпунова;

в) Тихонова;

г) Серпинского.

49. Бифуркация – это:

а) точка, в которой происходит качественная перестройка системы при изменении параметров системы;

б) точка, в которой происходит разрушение системы;

в) точка, в которой система переходит в стационарный режим;

- г) точка, после которой предсказать поведение системы невозможно.
50. Внутренняя (мягкая) бифуркация приводит к:
- а) качественной перестройке границ бассейнов аттракторов;
 - б) топологическим изменениям притягивающих множеств без изменения бассейнов притяжения;
 - в) образованию складок или расщеплений топологических поверхностей;
 - г) нет верного ответа.
51. Жесткая бифуркация (кризис) приводит к:
- а) качественной перестройке границ бассейнов аттракторов;
 - б) топологическим изменениям притягивающих множеств без изменения бассейнов притяжения;
 - в) образованию складок или расщеплений топологических поверхностей;
 - г) нет верного ответа.
52. Катастрофа – это:
- а) точка, в которой происходит смена режима устойчивости системы;
 - б) резкие значительные изменения переменных состояния динамической системы, вызванные малыми изменениями параметров;
 - в) точка, в которой система переходит в стационарный режим;
 - г) точка, после которой предсказать поведение системы невозможно.
53. Складка, сборка, бабочка, ласточкин хвост – это:
- а) бифуркации,
 - б) катастрофы;
 - в) стационарные состояния;
 - г) аттракторы.
54. Катастрофа – это:
- а) точка, в которой происходит качественная перестройка системы при изменении параметров системы;
 - б) точка, в которой происходит смена режима устойчивости системы;
 - в) точка, в которой система переходит в стационарный режим;
 - г) точка, после которой предсказать поведение системы невозможно.
55. Параметрический способ переключения триггерных систем состоит в:
- а) непосредственном воздействии на параметры системы;
 - б) непосредственном воздействии на независимые переменные системы;
 - в) изменении числа независимых переменных в уравнении;
 - г) изменении числа уравнений в системе.
56. Триггер – это:
- а) переключение из одного неустойчивого состояния в другое неустойчивое;
 - б) переключение из одного устойчивого состояния в другое устойчивое;
 - в) переключение из неустойчивого состояния в устойчивое;
 - г) переключение из устойчивого состояния в неустойчивое.
57. Силовой способ переключения триггерных систем состоит в:
- а) непосредственном воздействии на параметры системы;
 - б) непосредственном воздействии на независимые переменные системы;
 - в) изменении числа независимых переменных в уравнении;
 - г) изменении числа уравнений в системе.
58. Триггер – это:
- а) точка, в которой происходит качественная перестройка системы при изменении параметров системы;
 - б) резкие значительные изменения переменных состояния динамической системы, вызванные малыми изменениями параметров;
 - в) переключение из одного режима функционирования в другой;
 - г) переключение из устойчивого состояния в неустойчивое.
59. Переключение из одного режима функционирования в другой можно произвести:
- а) параметрическим способом;
 - б) непараметрическим способом;
 - в) редукцией переменных;
 - г) слиянием особых точек.

60. Какая неустойчивая особая точка возникает в модели межвидовой конкуренции «отбор одного из равноценных»?
- узел;
 - центр;
 - фокус;
 - седло.
61. В модели межвидовой конкуренции «отбор одного из равноценных» преобладание одного из объектов объясняется:
- более ранним возникновением и быстрым развитием одного из объектов;
 - отбором лучшего из всех конкурентов;
 - случайным стечением обстоятельств;
 - антагонизмом равноправных объектов и невозможностью их сосуществования.
62. Работа лактозного оперона Жакоба и Моно описывается с помощью модели:
- триггера;
 - автоколебаний;
 - динамического хаоса;
 - Ферхюльста.
63. Переключение из одного режима функционирования в другой можно произвести:
- непараметрическим способом;
 - силовым способом;
 - редукцией переменных;
 - слиянием особых точек.
64. Автоколебаниями называются:
- колебания, происходящие с постоянным периодом и амплитудой;
 - колебания, устанавливающиеся независимо от начальных условий;
 - колебания, поддерживающиеся благодаря свойствам системы, а не внешнему воздействию;
 - все ответы верные.
65. Автоколебаниям в фазовом пространстве соответствует аттрактор, называемый:
- особой точкой типа центр;
 - аттрактор Ресслера;
 - предельный цикл;
 - аттрактор Лоренца.
66. Предельный цикл называется устойчивым, если:
- все фазовые траектории, начинающиеся в окрестностях цикла, асимптотически приближаются к нему;
 - если существует хотя бы одна фазовая траектория, не приближающаяся к предельному циклу;
 - внутри него существует устойчивая особая точка;
 - колебания внутри цикла со временем затухают.
67. Внутри устойчивого предельного цикла имеется одна особая точка. Эта особая точка:
- устойчивый фокус или устойчивый узел;
 - неустойчивый фокус или неустойчивый узел;
 - седло;
 - внутри устойчивого предельного цикла не может быть особой точки.
68. Внутри неустойчивого предельного цикла имеется одна особая точка. Эта особая точка:
- устойчивый фокус или устойчивый узел;
 - неустойчивый фокус или неустойчивый узел;
 - седло;
 - внутри неустойчивого предельного цикла не может быть особой точки.
69. Предельный цикл есть:
- множество, к которому стремится изображающая точка системы с течением времени;
 - изолированная замкнутая кривая на фазовой плоскости, к которой в пределе при $t \rightarrow \infty$ стремятся все интегральные кривые;
 - совокупность всех состояний системы;

г) асимптотическая точка всех интегральных кривых, имеющих вид спиралей, вложенных друг в друга.

70. Система называется автоколебательной, если:

а) существует предельный цикл, причем все остальные траектории обязательно наматываются на него;

б) в системе существует только одна особая точка, отличная от узла, фокуса и центра (например, седло);

в) в системе имеются только простые особые точки;

г) колебания в системе имеют постоянные период и амплитуду, устанавливаются независимо от начальных условий и поддерживаются благодаря свойствам самой системы, а не вследствие воздействия периодической силы.

71. Если на фазовой плоскости существует замкнутая область, из которой фазовые траектории не выходят, и у которой нет особых точек, то:

а) в этой области есть предельный цикл;

б) в этой области пересекаются изоклины главных касательных;

в) в этой области есть репеллер;

г) в этой области есть точка бифуркации.

72. Если на фазовой плоскости существует замкнутая область, из которой фазовые траектории не выходят, и внутри которой есть неустойчивая особая точка, то:

а) в этой области есть предельный цикл;

б) в этой области пересекаются изоклины главных касательных;

в) в этой области есть репеллер;

г) в этой области есть точка бифуркации.

73. Критерием отсутствия предельных циклов является:

а) в системе нет особых точек;

б) в системе есть особая точка типа седло;

в) в системе есть простые особые точки, и через узел и фокус проходят интегральные кривые, уходящие в бесконечность;

г) все ответы верные.

74. Предельные циклы существуют в системах:

а) которые описываются нелинейными уравнениями;

б) в которых происходит смена устойчивости фокуса;

в) в которых происходит смена формы бассейна притяжения;

г) все перечисленное.

75. К моделям автоколебательных систем относятся:

а) модель Николаса-Лефевра (брюсселятор);

б) модель Лотки;

в) модель Мальтуса;

г) модель Вольтерра.

76. Хаотическое поведение в системах возникает:

а) из-за внешних источников шума;

б) из-за бесконечного количества степеней свободы;

в) из-за неопределенности, связанной с квантовой механикой;

г) из-за свойства нелинейных систем экспоненциально быстро разводить первоначально близкие траектории в ограниченной области фазового пространства.

77. Понятие «хаотическое поведение» означает:

а) нелинейность поведения системы;

б) непредсказуемость поведения системы на больших временах;

в) непредсказуемость поведения системы на малых временах;

г) однозначность закона изменения системы с течением времени.

78. Необходимые условия возникновения динамического хаоса:

а) нелинейность системы;

б) диссипативность системы;

в) наличие триггеров;

г) множественность анализируемых переменных.

79. Аттракторы в моделях динамического хаоса называются:

а) чудесными;

- б) странными;
 - в) фантастическими;
 - в) фрактальными.
80. Существование аттрактора в хаотических системах связано с:
- а) сжатием фазового пространства из-за потери части энергии;
 - б) наличием предельных циклов;
 - в) наличием особой устойчивой точки;
 - г) формой фазовых траекторий.
81. Какие из перечисленных терминов не относятся к динамическому хаосу?
- а) странный аттрактор;
 - б) фрактальная размерность;
 - в) удвоение периода;
 - г) синергетика.

Задания для диагностических работ

Тесты

Моделирование — это:

1. Процесс замены реального объекта (процесса, явления) моделью, отражающей его существенные признаки с точки зрения достижения конкретной цели
2. Процесс неформальной постановки конкретной задачи
3. Процесс замены реального объекта (процесса, явления) другим материальным или идеальным объектом
4. Процесс выявления существенных признаков рассматриваемого объекта

Укажите ЛОЖНОЕ утверждение:

1. “Строгих правил построения любой модели сформулировать невозможно”
2. “Никакая модель не может заменить само явление, но при решении конкретной задачи она может оказаться очень полезным инструментом”
3. “Совершенно неважно, какие объекты выбираются в качестве моделирующих — главное, чтобы с их помощью можно было бы отразить наиболее существенные черты, признаки изучаемого объекта”
4. “Модель содержит столько же информации, сколько и моделируемый объект”

Редукцию системы уравнений позволяет провести:

- а) разделение переменных на быстрые, средние и медленные;
- б) линеаризация уравнений;
- в) нахождение особой точки;
- г) логарифмирование.

Бифуркация – это:

- а) точка, в которой происходит качественная перестройка системы при изменении параметров системы;
- б) точка, в которой происходит разрушение системы;
- в) точка, в которой система переходит в стационарный режим;
- г) точка, после которой предсказать поведение системы невозможно.

Система поиска информации в Интернете включает работу с:

- а) браузерами (программами – просмотрщиками)
- б) метапоисковыми машинами
- в) каталогами
- г) всеми названными инструментами

Краткий ответ

1. Выравнивание последовательности на всем ее протяжении относительно другой последовательности называется _____

Ответ: глобальным

2. Выравнивание отдельных участков последовательности относительно отдельных участков другой последовательности с целью поиска максимально сходных фрагментов - это _____

Ответ: локальное выравнивание

3. Каких онлайн-инструмент можно пользоваться для выравнивания нуклеотидных последовательностей длиной до 4 т.п.н.

Ответ: Clustal Omega

Малое эссе

1. Цель множественного выравнивания последовательностей

Ответ: Цель множественного выравнивания последовательностей состоит в том, чтобы произвести краткую, но исчерпывающую характеристику данных о структуре последовательностей, на основании которой можно будет принять решение о принадлежности этих последовательностей к рассматриваемому семейству генов. По сравнению с попарным, множественное выравнивание даёт больше информации об эволюционной консервативности.

Тесты

Выберите вариант с правильной расстановкой этапов эксперимента:

а) постановка (формулировка) задачи — построение модели — отыскание решения — проверка модели и оценка решения — внедрение решения;

б) постановка (формулировка) задачи — отыскание решения — построение модели — проверка модели и оценка решения — внедрение решения;

в) построение модели — постановка (формулировка) задачи — отыскание решения — проверка модели и оценка решения — внедрение решения;

г) постановка (формулировка) задачи — построение модели — отыскание решения — внедрение решения — проверка модели и оценка решения.

Процесс построения модели, как правило, предполагает:

а) описание всех свойств исследуемого объекта;

б) выделение наиболее существенных с точки зрения решаемой задачи свойств объекта;

в) выделение свойств объекта безотносительно к целям решаемой задачи;

г) описание всех пространственно-временных характеристик изучаемого объекта;

Математическая модель объекта — это:

а) описание в виде схемы внутренней структуры изучаемого объекта;

б) совокупность данных, содержащих информацию о количественных характеристиках объекта и его поведения в виде таблицы;

в) совокупность записанных на языке математики формул, отражающих те или иные свойства объекта-оригинала или его поведение;

г) последовательность математических формул, описывающих объект или его поведение.

Целями моделирования являются:

а) прогнозирование поведения системы;

б) управление системой или проектирование системы;

в) статистическая обработка результатов исследования;

г) синтез новых систем на основе уже существующих.

Принципы моделирования:

а) адекватность;

б) экономность;

в) осуществимость;

г) все ответы верны.

Недостатки моделирования:

- а) может предсказать явление, но не доказать его существование;
- б) подходит для ограниченного круга объектов;
- в) не дает объяснения полученных результатов;
- г) не имеет ничего общего с действительностью.

В биологии классификация представителей животного мира представляет собой:

- а) иерархическую модель;
- б) табличную модель;
- в) графическую модель;
- г) натурную модель.

Биологические процессы обычно описывают:

- а) линейными уравнениями;
- б) дифференциальными уравнениями;
- в) квадратными уравнениями;
- г) интегральными уравнениями.

Состояние равновесия устойчиво, если:

- а) малые отклонения не выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
- б) малые отклонения выводят систему из ближайших окрестностей этого состояния;
- в) малые отклонения со временем затухают;
- г) малые отклонения со временем усиливаются.

Семейство компьютерных программ, служащих для поиска сходных аминокислотных или нуклеотидных последовательностей:

- а) Clustal;
- б) BLAST;
- в) HyperChem;
- г) RasMol.

RasMol – компьютерная программа, предназначенная для:

- а) визуализации молекул и используемая преимущественно для изучения и получения изображений пространственных структур биологических макромолекул, в первую очередь белков и нуклеиновых кислот;
- б) поиска гомологичных белков и нуклеотидных последовательностей;
- в) молекулярного моделирования, позволяющая предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы в сайте связывания другой;
- г) статистической обработки результатов молекулярно-биологических исследований.

Краткий ответ

Метод молекулярного моделирования, позволяющий предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы (лиганда) в сайте связывания другой (рецептора)

Ответ: Молекулярный докинг

Собирательное название методов исследования структуры и свойств молекул вычислительными методами с последующей визуализацией результатов, обеспечивающие их трехмерное представления при заданных в расчете условиях

Ответ: Молекулярное моделирование

Метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения

Ответ: Метод молекулярной динамики

Малое эссе

Условия для успешного докинга

Ответ: Успешный докинг требует выполнения двух условий:

- 1) Создание набора конформаций, который надёжно включает, по крайней мере, хотя бы одну «достоверную»;
- 2) Надёжно отличает «достоверные» конформаций от других.

Что представляет докинг с точки зрения математики?

С математической точки зрения докинг представляет собой поиск глобального минимума функции свободной энергии, заданной на многомерном пространстве всех возможных способов связывания лиганда с белком.

Большое эссе

Понятие о протеоме. Протеомика, ее задачи. Структурная и функциональная протеомика.

Ответ: Протеомика – наука, занимающаяся изучением совокупности белков и их взаимодействий в живых организмах (протеом – совокупность всех белков организма). Протеомика в общих чертах включает в себя структурную протеомику, функциональную протеомику и прикладную протеомику. Структурная протеомика

Чтобы получить сведения о протеоме, необходимо сначала его выделить и очистить от других молекул. Поскольку число белков во всем протеоме (т.е. во всем организме) весьма велико, обычно берут только часть организма (его орган или ткань) и различными методами выделяют белковую компоненту. За почти 200-летнюю историю изучения белков разработано множество методов выделения белков – от простого солевого осаждения до современных сложных методов, учитывающих различные физические и химические свойства этих веществ. После получения чистой фракции индивидуального белка определяется его химическая структура.

В структурной протеомике проводится определение структуры не одного, а сразу множества белков, и к настоящему времени для этого разработан специальный цикл процедур и создан арсенал соответствующих высокоточных приборов.

После выделения и очистки протеома с помощью двумерного электрофореза проводится разделение белков. Это разделение идет по двум направлениям: в одном разделяются молекулы белка, имеющие разную массу, в другом – различный суммарный электрический заряд. В результате этой тончайшей процедуры на специальном носителе одинаковые молекулы группируются, образуя макроскопические пятна, причем в каждом пятне содержатся только одинаковые молекулы. Число пятен, т.е. число разных белков или пептидов, может составлять многие тысячи, и для их исследования используются автоматические устройства для обработки и анализа. Затем проводится отбор пятен и введение содержащихся в них веществ в самый сложный физический прибор – масс-спектрометр, с помощью которого и определяется химическая (первичная) структура каждого белка.

Первичную структуру белка можно также определить, пользуясь результатами геномики и биоинформатики. Однако аминокислотная последовательность не раскрывает пространственную структуру белка. Она специфическим для каждой последовательности образом сворачивается в уникальную пространственную структуру, которая может быть определена с помощью двух мощных физических методов – рентгеноструктурного анализа и метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР-спектроскопии). Таким образом, задача структурной протеомики сводится к выделению, очистке, определению первичной, вторичной и третичной структур всех белков живого организма, а ее основными средствами являются двумерный электрофорез, масс-спектрометрия и биоинформатика.

Функциональная протеомика

Наличие в организме того или иного белка дает основание предполагать, что он обладает (или обладал) определенной функцией, а весь протеом служит для того, чтобы осуществлялась полноценная жизнедеятельность всего организма. Функциональная протеомика занимается определением функциональных свойств протеома, и решаемые ею задачи существенно сложнее, чем, например, определение белково-пептидных структур.

Очевидно, что функционирование протеома осуществляется в многокомпонентной среде, в которой присутствует множество молекул других химических классов – сахаров, липидов, простагландинов, различных ионов и многих других веществ, включая молекулы воды. Белковые молекулы взаимодействуют с окружающими их другими или такими же, как и они, структурами, что в конечном итоге приводит к возникновению функциональных реакций сначала на молекулярном уровне, а затем и на макроскопическом. Уже известно множество таких процессов, в том числе с участием белков. Среди них взаимодействие фермента с субстратом, антигена с антителом, пептидов с рецепторами, токсинов с ионными каналами и т.д. (рецепторы и ионные каналы также являются белковыми образованиями). Для выявления механизмов этих процессов проводятся как экспериментальные исследования индивидуальных участников взаимодействия, так и системные исследования средствами биоинформатики.

Что представляет собой метод молекулярной механики?

Ответ: Молекулярная механика — один из подходов в молекулярном моделировании, использующий классическую механику для описания физических основ модели. Атомы (ядра с электронами) представляются точечными массами с соответствующими зарядами. Взаимодействия между соседними атомами включают упругие взаимодействия (соответствующие химическим связям) и силы Ван-дер-Ваальса, описываемые традиционно потенциалом Леннарда-Джонса. Электростатические взаимодействия вычисляются по закону Кулона. Атомам в пространстве присваиваются декартовы, или внутренние, координаты; в динамических расчётах атомам также могут быть присвоены скорости, соответствующие температуре. Обобщающее математическое выражение известно как потенциальная функция и соответствует внутренней энергии системы — термодинамической величине, равной сумме потенциальной и кинетической энергии. Потенциальная функция представляет потенциальную энергию как сумму энергетических членов, соответствующих отклонению от равновесных значений в длинах связей, валентных и торсионных углах, и членов для не связанных пар атомов, соответствующих ван-дер-ваальсовым и электростатическим взаимодействиям. Набор параметров, состоящий из равновесных значений длин связей, валентных углов, величин парциальных зарядов, силовых констант и ван-дер-ваальсовых параметров, называется силовым полем. Различные реализации молекулярной механики используют слегка отличающиеся математические выражения и, следовательно, различные константы в потенциальной функции. Распространенные силовые поля, используемые в настоящее время, были разработаны с использованием точных квантовых расчетов и (или) подгонкой под экспериментальные данные.

Для поиска локального минимума потенциальной энергии используются соответствующие методы минимизации (например, метод наискорейшего спуска и метод сопряженных градиентов). И для минимизации, и для молекулярной динамики главным образом используется второй закон Ньютона. Интегрирование этого закона движения с помощью различных алгоритмов приводит к получению траекторий атомов в пространстве и времени. Сила, действующая на атом, определяется как отрицательная производная функции потенциальной энергии.

Молекулы могут быть смоделированы как в вакууме, так и в присутствии растворителя, например воды. Расчёты систем в вакууме называются расчётами «в газовой фазе», в то время как расчёты, включающие молекулы растворителя, называются расчётами «с явно заданным растворителем». Другая группа расчётов учитывает наличие растворителя оценочно, с помощью дополнительных членов в потенциальной функции — так называемые расчёты «с неявным растворителем».

Описание технологии проведения

Тестирование проводится дистанционно на базе ЭУМК «Компьютерные исследования и моделирование биопроцессов», расположенного по адресу: <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2554> на портале «Электронный университет ВГУ». На выполнение теста отводится 45 минут. Предоставляется 1 попытка.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Для оценивания результатов защиты курсовой работы используется качественная шкала: «зачтено», «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется, если даны правильные ответы на 60% вопросов и более (суммарная оценка 16 баллов и выше);

оценка «не зачтено» выставляется, если даны правильные ответы менее чем на 60% вопросов (суммарная оценка менее 16 баллов).

Темы курсовых работ

- 1) История развития компьютерного моделирования.
- 2) Классификация математических моделей
- 3) Специфика имитационного моделирования биологических процессов и систем.
- 4) Основные тенденции и направления развития методов моделирования биологических процессов и систем.
- 5) Аннотации генома, поиск генов, поиск сайтов репликации в геноме человека.
- 6) Компьютерный дизайн лекарственных средств
- 7) Метаболомика и проблема антибиотикорезистентности
- 8) Геномика и медицина
- 9) Филогенетические деревья
- 10) Компьютерный анализ генетических текстов.
- 11)

Описание технологии проведения

Курсовая работа выполняется в течение 6 семестра в соответствии с планом и графиком под руководством преподавателя дисциплины или научного руководителя. Курсовая работа должна быть оформлена в соответствии с требованиями, предъявляемыми к курсовым и выпускным квалификационным работам, подписана исполнителем, научным руководителем и заведующим кафедрой. Защита курсовой работы проходит на заседании кафедры в конце семестра и является частью промежуточной аттестации. Обучающийся докладывает основные результаты своего научного исследования. Доклад сопровождается презентацией. Время, отводимое на доклад, составляет 7-10 минут. По окончании доклада обучающийся отвечает на вопросы. По результатам защиты выставляется оценка по 4-балльной шкале.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Для оценивания результатов защиты курсовой работы используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Основными критериями оценки курсовой работы являются:

- актуальность и научная значимость темы исследования, уровень грамотности при их обосновании;
- уровень теоретико-практического анализа рассматриваемой проблемы (ситуации);
- полнота описания характеристик объекта исследования в рамках поставленной цели и решаемых задач;
- наличие взаимосвязи между частями исследования, логической последовательности и системности изложения материала;
- уровень проведения экспериментальных исследований (точность количественных измерений, репрезентативность выборки);
- адекватность и соответствие выводов, представленных в работе, полученным результатам, сформулированной цели и задачам исследования;
- степень полноты охвата информационных источников по теме работы, качественный уровень анализа и обобщения информации;
- качество интерпретации решаемой задачи с точки зрения современной научной парадигмы, применение актуальных и адекватных поставленным задачам методов исследования;
- степень самостоятельности выполнения курсовой работы и уровень аргументированности суждений при изложении собственного мнения по изучаемому вопросу (проблеме или объекту);
- уровень оформления текста курсовой работы и презентационных материалов при ее защите;
- степень правильности ответов на дополнительные вопросы;
- уровень сформированности профессиональных компетенций.

20.2. Промежуточная аттестация


Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Перечень вопросов к экзамену:

1. Модели биологических процессов. Понятие модели. Объект, цели и методы моделирования. Компьютерные и математические модели. История первых моделей в биологии.
2. Современная классификация моделей биологических процессов. Регрессионные, имитационные, качественные модели. Принципы имитационного моделирования и примеры моделей. Специфика моделирования живых систем.
3. Модели, описываемые одним дифференциальным уравнением. Понятие решения одного автономного дифференциального уравнения. Стационарное состояние (состояние равновесия). Решение линейного дифференциального уравнения.
4. Модели, описываемые одним дифференциальным уравнением. Устойчивость состояния равновесия. Методы оценки устойчивости.
5. Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений. Фазовая плоскость. Фазовый портрет. Метод изоклин.
6. Модели, описываемые системами двух автономных дифференциальных уравнений. Устойчивость стационарного состояния. Линейные системы. Типы особых точек.
7. Проблема быстрых и медленных переменных. Метод квазистационарных состояний. Теорема Тихонова. Уравнение Михаэлиса-Ментен.
8. Бифуркации динамических систем. Типы бифуркаций. Бифуркационные диаграммы и фазопараметрические портреты. Катастрофы.
9. Триггер. Примеры систем с двумя устойчивыми стационарными состояниями. Конкуренция. Силовое и параметрическое переключение триггера. Эволюция. Отбор одного из двух или нескольких равноправных видов. Генетический триггер Жакоба и Моно.
10. Понятие автоколебаний. Изображение автоколебательной системы на фазовой плоскости. Предельные циклы. Условия существования предельных циклов.
11. Рождение предельного цикла. Бифуркация Андронова-Хопфа. Автокатализ. Типы обратной связи. Брюсселятор. Гликолиз. Модели клеточного цикла.
12. Основные понятия теории динамических систем. Предельные множества. Аттракторы. Странные аттракторы.
13. Динамический хаос. Диссипативные системы. Устойчивость хаотических решений. Размерность странных аттракторов.
14. Цели и типы выравнивания. Парное и множественное выравнивания.
15. Локальное и глобальное выравнивания. Алгоритмы глобального и локального выравнивания.
16. Выравнивание. Матрицы сходства последовательностей. Гомологичные фрагменты и палиндромы.
17. Матрицы аминокислотных замен. Вывод матриц PAM для дальних гомологов.
18. Матрицы аминокислотных замен. Вывод матриц BLOSUM. Различия между матрицами PAM и BLOSUM.
19. Задача распознавания фолда. Алгоритмы, лежащие в основе метода протягивания.
20. Мера сходства последовательностей. Расстояние Хэмминга. Расстояние Левенштейна. Вес операций редактирования.
21. Диагностика болезни и риска заболевания. Индивидуально-специфическое лечение. Идентификация мишеней для лекарственных средств. Генная терапия.
22. Гомология, филогения и эволюционные деревья.
23. Анализ и предсказание структуры белков. Предсказание вторичной структуры белка. Метод Чоу-Фасмена, GOR, нейронных сетей и поиска «ближайшего соседа».
24. Анализ и предсказание структуры белков. Предсказание третичной структуры белка. Проблемы и ограничения.
25. Физические основы метода молекулярной динамики.
26. Прямые компьютерные модели биологических процессов (на примере фотосинтетической мембраны).

Промежуточная аттестация по дисциплине "Физика ферментов" проводится в форме устного экзамена. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя 2 теоретических вопроса, позволяющих оценить уровень полученных знаний и 1 практическое задание (задачу), позволяющее оценить степень сформированности умений и навыков. На подготовку ответа дается 45 минут.

Пример контрольно-измерительных материалов для промежуточной аттестации (экзамен)

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
биофизики и биотехнологии
 В.Г. Артюхов
29.05.2023 г.

Направление подготовки 06.03.01 Биология

Дисциплина Б.1.В.05 Компьютерные исследования и моделирование биологических систем и процессов

Форма обучения очная

Вид контроля экзамен

Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Модели биологических процессов Понятие модели. Объект, цели и методы моделирования. Компьютерные и математические модели. История первых моделей в биологии.
2. Задача распознавания фолда. Алгоритмы, лежащие в основе метода протягивания

Преподаватель



Е.А. Калаева

Описание технологии проведения

Промежуточная аттестация по дисциплине "Компьютерные исследования и моделирование биологических систем и процессов" проводится в форме устного экзамена. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя 2 теоретических вопроса, позволяющих оценить уровень полученных знаний. На подготовку ответа дается 30 минут.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели:

- 1) знание основы математики, математического и компьютерного моделирования биопроцессов; основы биотехнологии и генной инженерии, нанобиотехнологии, молекулярного моделирования, биоинформатики
- 2) умение применять фундаментальные знания в приложении к изучаемой дисциплине; критически анализировать и переоценивать свой профессиональный и социальный опыт; анализировать биообъекты, описывать поведение биосистем различных уровней организации с помощью формальных (математических) и компьютерных методов;
- 3) умение иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований;
- 4) владение методами математического и компьютерного моделирования; навыками применения полученных знаний в других областях деятельности; работой с пакетами прикладных компьютерных программ, основами компьютерного анализа и моделирования биосистем и биопроцессов.

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».