

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанofізики конденсованих середовищ



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ


Моделювання складних систем

(повна назва дисципліни)

для студентів

| | |
|------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| галузь знань | 09 Біологія <i>(шифр і назва)</i> |
| спеціальність | 091 Біологія <i>(шифр і назва спеціальності)</i> |
| освітній рівень | магістр <i>(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)</i> |
| освітня програма | Біоінформатика та структурна біологія <i>(назва освітньої програми)</i> |
| вид дисципліни | <u>обов'язкова</u> |

| | |
|-----------------------------------------|------------|
| Форма навчання | денна |
| Навчальний рік | 2020/2021 |
| Семестр | 2 |
| Кількість кредитів ECTS | 5.0 |
| Мова викладання, навчання та оцінювання | українська |
| Форма заключного контролю | іспит |

Викладач: Русінчук Наталя Миколаївна, асистент кафедри нанofізики конденсованих середовищ 

Пролонговано: на 20²¹/20²² н.р.  (підпис, ПІБ, дата) «05» 03 2021 р. проф. 23

на 20__/20__ н.р. (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2020

Розробники:

Русінчук Наталя Миколаївна, к.ф.-м.н., асистент, кафедра нанofізики конденсованих середовищ

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанofізики конденсованих середовищ



(Скришевський В.А.)
(прізвище та ініціали)

Протокол № 8 від «12» червня 2020 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «24» червня 2020 року № 3

Голова науково-методичної комісії



(Русінчук Н.М.)
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з основними підходами до моделювання складних біологічних систем, що характеризуються наявністю комплексних зв'язків між елементами, розподіленістю в просторі, стохастичністю.

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

1. Мати базові знання з вищої математики та математичного аналізу.
2. Знання та володіння числовими алгоритмами для розв'язання біологічних задач.
3. Володіти навичками використання сучасних типових числових методів.
4. Володіти елементарними навичками складання алгоритмів та написання програм для реалізації обчислень.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Предметом навчальної дисципліни є моделювання складних біологічних систем.

В курсі робиться короткий огляд основних ознак складної системи. Після цього студенти мають змогу вивчити теоретичні основи підходів до моделювання складних систем та використати їх на практиці для розв'язання реальних задач в галузі біології та біоінформатики. Основними підходами до моделювання складних систем, що розглядаються під час вивчення дисципліни є: зменшення розмірності систем, визначення стаціонарних станів систем, врахування стохастичності системи, визначення закону розподілу випадкової величини для заміни її генератором, узгодження ієрархії довжин та часів у системах, розв'язання задач оптимізації, вейвлет аналіз та оптимізація роботи написаних програм.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліни має на меті розвинути у студентів здатність до прийняття рішень у складних умовах при роботі із складними біологічними системами, що потребує знань про основні підходи до розв'язання таких задач, їх переваги, недоліки та границі застосовності, а також вміння використовувати сучасні інформаційні технології та аналізувати інформацію в галузі біології і на межі предметних галузей, здатність застосовувати знання з математики у професійній діяльності з урахуванням новітніх досягнень, у т.ч. для дослідницької роботи та вміння формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.

Вивчення дисципліни спрямоване на формування таких компетентностей:

ЗК02. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК03. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

СК01. Здатність користуватися новітніми досягненнями біології, необхідними для професійної, дослідницької та/або інноваційної діяльності. Здатність застосовувати знання у професійній діяльності з урахуванням новітніх досягнень, у т.ч. для дослідницької роботи.

СК02. Здатність формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів на прикладі різних рівнів організації живого із використанням математичних методів й інформаційних технологій.

СК03. Здатність користуватися сучасними інформаційними технологіями та аналізувати інформацію в галузі біології і на межі предметних галузей.

СК11. Вміння розробляти програмне забезпечення для обробки біомолекулярних даних.

5. Результати навчання за дисципліною:

| Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність) | | Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання | Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності) | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| Код | Результат навчання | | | |
| 1.1 | Знати основні ознаки складної системи та підходи до їх моделювання. | Лекції | | 24% |

| | | | | |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| 1.2 | Знати основні методи, що використовуються для розв'язання диференціальних рівнянь різних порядків та їх систем, розуміти межі їх застосовності, точність. | | Екзамен: запитання з розгорнутою відповіддю | |
| 1.3 | Знати основні підходи, що застосовуються до оптимізації роботи програм: використання спеціальних бібліотек, паралельність процесів, заміна складових генерат | | | |
| 1.4 | Знати перелік задач сучасної біології, до розв'язання яких застосовуються специфічні математичні методи моделювання складних систем. | Самостійна робота студента | Семестрова робота студента: знання меж застосовності Лабораторні роботи: захист, знання меж застосовності | 3% 4% |
| 2.1 | Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для створення комп'ютерних моделей реальних біологічних об'єктів та біологічних процесів у складних системах. | Практичні заняття та лабораторні роботи | Лабораторні роботи: звіт | 24% |
| 3.1 | Вміти донести інформацію про постановку задач у моделюванні складних систем та математичні методи їх розв'язання до аудиторії. | Самостійна робота студента | Доповідь під час практичного: якість представлення | 5% |
| 4.1 | Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору методу для побудови моделі конкретної біологічної системи та трактувати отримані результати. | Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента | Семестрова робота студента: обґрунтування методів та захист Лабораторна робота: захист, обґрунтування методів та висновки Розв'язання задачі на екзамені | 4% 20% 16% |

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

| Результати навчання дисципліни | 1.1 | 1.2 | 1.3 | 1.4 | 2.1 | 3.1 | 4.1 |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Програмні результати навчання | | | | | | | |
| ПР2. Використовувати бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації. | | | | + | + | + | + |
| ПР4. Розв'язувати складні задачі в галузі біології, генерувати та оцінювати ідеї. | + | + | + | + | + | | |
| ПР11. Проводити статистичну обробку, аналіз та узагальнення отриманих експериментальних даних із використанням програмних засобів та сучасних інформаційних технологій. | + | + | + | + | + | | + |
| ПР5. Аналізувати та оцінювати вплив досягнень біології на розвиток суспільства. | | | | | + | | + |
| ПР16. Моделювати об'єкти і процеси у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій. | + | + | + | + | + | | + |
| ПР17. Розробляти програмне забезпечення для обробки біомолекулярних даних. | + | + | + | + | + | + | + |

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Лабораторні роботи: виконання та захист (4 роботи): 12 балів/9 балів

2. Доповідь під час практичного: 12 балів/0 балів.

Усього: 60 балів/36 балів.

- підсумкове оцінювання: екзамен: 40 балів/24 бали.

Структура екзаменаційного білета: 2 запитання з розгорнутою відповіддю (РН1.1-1.3) по 12 балів + 1 практичне завдання з захистом (16 балів).

| Оцінювання | Min | Max |
|-----------------------|-----------|------------|
| Семестрове оцінювання | 36 | 60 |
| Екзамен | 24 | 40 |
| Всього | 60 | 100 |

7.2 Організація оцінювання:

Після другого практичного заняття студенти завдання для самостійного розв'язання та на основі цього підготовки коротких (3-5 хвилин) **доповідей під час проведення наступних практичних**. Починаючи з 3 практичного заняття студенти роблять свої доповіді із використанням будь-яких методів та форм представлення інформації: доповідь оцінюється з точки зору правильності отриманих результатів, структури доповіді, пояснення отриманих результатів у 7 балів, а якість донесення інформації до аудиторії – у 5 балів. Мінімум за дане завдання – 0 балів – у разі невиконання студентом завдання протягом семестру.

Під час лабораторного практикуму протягом семестру студенти мають виконати, підготувати звіт та усно захистити **4 лабораторні роботи**.

Студент допускається до екзамену лише за умови виконання усіх 4 лабораторних робіт, підготовки по ним звіту та усного їх захисту хоча б на мінімально можливий бал.

Вивчення курсу завершується письмовим екзаменом з усною співбесідою. Екзамен спрямований на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр та вміння застосовувати отримані знання до розв'язання задач. Екзамен вважається складеним, якщо студент отримав мінімально можливу оцінку– 24 бали.

7.3 Шкала відповідності оцінок

| | |
|----------------------------------|--------|
| Відмінно / Excellent | 90-100 |
| Добре / Good | 75-89 |
| Задовільно / Satisfactory | 60-74 |
| Незадовільно / Fail | 0-59 |
| Зараховано / Passed | 60-100 |
| Не зараховано / Fail | 0-59 |

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

| № п/п | Назва теми | Кількість годин | | | |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|-----------|-------------|-------------------|
| | | лекції | практичні | лабораторні | самостійна робота |
| 1 | Вступ. Тема 1 <i>Поняття складної системи. Складні системи в біології. Особливості моделювання складних систем. Особливості математичного апарату для моделей складних систем. Складна геометрія та способи її описання. Рівняння кривих на площині та у просторі. Матриці повороту систем координат. Спеціальні системи координат та робота з ними.</i> | 2 | 2 | - | 8 |
| 2 | Тема 2. <i>Способи оптимізації роботи програм: використання спеціальних бібліотек, використання класів, паралельність обчислень.</i> | 2 | 2 | - | 8 |
| 3 | Тема 3. <i>Поняття системи. Стаціонарні точки та стаціонарні стани системи. Біологічні тригери.</i> | 2 | 2 | 2 | 12 |
| 4 | Тема 4. <i>Моделювання систем з багатьох агентів. Швидкі та повільні змінні в біології. Особливості моделей систем з ієрархією характеристичних часів.</i> | 2 | 2 | - | 8 |
| 5 | Тема 5. <i>Розподілені біологічні системи. Описання зв'язаних систем із складною геометрією та нерівномірним розподілом властивостей. Проблема граничних умов. Системи «реакція-дифузія», утворення порядку з хаосу.</i> | 2 | 2 | 2 | 12 |
| 6 | Тема 6. <i>Розподілені біологічні системи. Моделювання розподілених біологічних систем за допомогою клітинних автоматів.</i> | 2 | 2 | 2 | 12 |
| 7 | Тема 7. <i>Статистичний аналіз даних. Визначення закону розподілу випадкової величини. Визначення основних параметрів виборки. Статистичні гіпотези, їх формулювання та перевірка.</i> | 2 | 2 | - | 8 |
| 8 | Тема 8. <i>Вейвлет-аналіз даних. Застосування вейвлет-аналізу до обробки експериментальних даних, дослідження білків, аналізу послідовностей ДНК.</i> | 2 | 2 | - | 8 |
| 9 | Тема 9. <i>Задача оптимізації. Підходи до розв'язання задач оптимізації. Оптимізація в біології та біоінформатиці.</i> | 2 | 2 | 2 | 12 |
| 10 | Тема 10. <i>Агентно-орієнтоване моделювання. Агентно-орієнтовані моделі біологічних систем. Підсумки курсу.</i> | 2 | 2 | 2 | 12 |
| | ВСЬОГО | 20 | 20 | 10 | 100 |

Загальний обсяг 150 год., в тому числі:

Лекцій – **20 год.**

Практичні заняття - **20 год.**

Лабораторні заняття – **10 год.**

Самостійна робота - **100 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Ризниченко Г.Ю. Лекции по математическим моделям в биологии, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011 г.
2. Quine J.R. Mathematical techniques in structural biology: lecture notes, Florida State University
3. Murray J.D. Mathematical Biology: I. An Introduction, Springer, 2002.
4. Murray J.D. Mathematical Biology: II. Spatial Models and Biomedical Applications, Springer, 2003.

Додаткова:

1. Muller J. Mathematical Models in Biology, Lectures 2003-2004
2. Jost J. Mathematical Methods in Biology and Neurobiology, Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, 2007
3. Kisdi E. Mathematical Methods in Biology: lecture notes, University of Helsinki
4. Chasnov J.R. Mathematical Biology: Lecture notes, The Hong Kong University of Science and Technology, 2016

10. Додаткові ресурси:

1. <https://diveintopython3.problemsolving.io/>
2. <https://www.scipy.org/>