

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	SYMULACJE MOLEKULARNE, PG_00070148						
Kierunek studiów	InfoBioChem						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski Literatura i materiały dodatkowe w jęz. angielskim		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. inż. Jacek Czub				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		prof. dr hab. inż. Jacek Czub				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	30.0	0.0	45
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=6206						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	45		2.0		3.0	50
Cel przedmiotu	Przedmiot ma na celu przekrojowe zapoznanie studenta z zastosowaniami symulacji molekularnych w pracy badawczej oraz praktyczne pogłębione wprowadzenie do praktyki pracy symulacyjnej w wybranych jej aspektach. Część teoretyczna obejmuje szeroki przegląd podstaw fizycznych, stosowanych uproszczeń, specjalistycznych zastosowań i nowoczesnych standardów, które umożliwiają krytyczną ocenę i planowanie projektów obejmujących symulacje molekularne, z naciskiem na typ stawianej hipotezy badawczej i możliwość jej walidacji. Część praktyczna ma na celu przekazanie dobrych praktyk, zaznajomienie z najpopularniejszym oprogramowaniem symulacyjnym, a także ilustrację wieloetapowej organizacji zadań w każdym projekcie - od doboru metodologii poprzez definicję układu molekularnego i uruchomienie symulacji aż po analizę otrzymanych danych i formułowanie wniosków.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W01] zna i rozumie metody, techniki i narzędzia stosowane przy rozwiązywaniu zadań bioinformatycznych w tym z zakresu modelowania molekularnego	rozumie pojęcie modelowania wieloskalowego, identyfikuje ograniczenia metod symulacyjnych i zna rozszerzenia pozwalające na ich obejście, a także dysponuje podstawową intuicją przy interpretacji typowych wyników badań symulacyjnych	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_K03] jest gotów do precyzyjnego formułowania pytań w celu pogłębienia własnego rozumienia zagadnienia lub zidentyfikowania brakujących elementów rozumowania	potrafi zaproponować hipotezę badawczą znajdującą się w zakresie stosowności metod symulacyjnych, dopasować do niej konkretną metodę badawczą, a także przedyskutować i uzasadnić swój wybór	[SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy [SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie
	[K7_U05] potrafi wybrać metody modelowania komputerowego i zastosować je do rozwiązywania problemów z zakresu funkcjonowania i regulacji złożonych układów	potrafi przeprowadzić sekwencję kroków od definicji układu symulacyjnego poprzez konfigurację oprogramowania i przeprowadzenie symulacji po analizę danych i weryfikację hipotezy badawczej	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład • Podstawy symulacji: motywacja i główne algorytmy • Reprezentacje biomakromolekuł • Pole siłowe i jego składowe • Analiza prostej symulacji • Podstawy mechaniki statystycznej • Metody wzmożonego próbkowania • Modelowanie danych eksperymentalnych • Symulacje kwantowo-klasyczne (QM/MM) • Symulacje gruboziarniste • Strategie obejścia ograniczeń klasycznych symulacji • Techniczne aspekty symulacji • Integracja symulacji z wiedzą bioinformatyczną • Dokumentacja i dostępność danych symulacyjnych • Przyszłość symulacji molekularnych Treści przedmiotu - projekt • Przygotowanie i przeprowadzenie standardowej symulacji dynamiki molekularnej dla krótkiego biopolimeru oraz analiza jego zachowania w różnych polach siłowych • Sformułowanie hipotezy badawczej i wybór zaawansowanej metody symulacyjnej dla jej weryfikacji • Dobór układu biomolekularnego dla walidacji przyjętej hipotezy • Konfiguracja oprogramowania adekwatnego do wybranej metody i układu • Przygotowanie i analiza symulacji z wykorzystaniem otwartego oprogramowania • Analiza wyników, formułowanie wniosków, potwierdzenie lub odrzucenie hipotezy • Opracowanie i prezentacja minireportu z wykonanych obliczeń		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość podstaw fizyki (oddziaływania elektrostatyczne, model harmoniczny), fundamentalna wiedza biochemiczna (skład i struktura biomolekuł), podstawowa znajomość języka programowania Python		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Projekt: ocena projektu praktycznego	50.0%	50.0%
	Wykład: kolokwium zaliczeniowe	50.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Daniel M. Zuckerman, "Statistical Physics of Biomolecules. An Introduction" GROMACS Reference Manual (Documentation, Rozdział 5)	
	Uzupełniająca lista lektur	Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry" Ivet Bahar, Robert L. Jernigan, Ken A. Dill, "Protein Actions. Principles and Modeling"	

	Adresy eZasobów	Uzupełniające https://www.youtube.com/watch?v=TDzzvKoDOuQ&list=PLuIpgNT2hMwRQKFy4okoNQKiJwM8li3Sz - Molecular Biophysics - seria wykładów Erika Lindahla o podstawowych conceptach dotyczących symulacji biomolekularnych https://phasespaceinvaders.buzzsprout.com/ - Phase Space Invaders - podcast/seria wywiadów z czołowymi liderami grup badawczych o historii i rozwoju ich programów badawczych oraz perspektywach dla dyscypliny
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	• Zinterpretuj, co dzieje się w układzie symulacyjnym w oparciu o załączone wykresy. • Zaproponuj metodologię symulacyjną dla badania następujących procesów: 1. adsorpcja białka na metalowej katodzie 2. przesunięcie spektrum absorpcji światła na skutek zmiany środowiska 3. spadek stałej wiązania na skutek mutacji w domenie białka • Ustal, jaki element struktury decyduje o niestabilności symulacji przy stopniowym zwiększaniu kroku czasowego. • Zbadaj wpływ wysokich stężeń soli na wartość pKa polielektrolitu. • Ustal, przy jakim stężeniu składnika A rozpoczyna się rozdział mieszaniny na wyraźne fazy.	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.