



Математичне моделювання біомедичних систем і процесів

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>11 Математика і статистика</i>
Спеціальність	<i>113 Прикладна математика</i>
Освітня програма	<i>ОНП Наука про дані та математичне моделювання</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, зимовий семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити: лекції – 18 год; лабораторні – 18 год.</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік, МКР</i>
Розклад занять	
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: доктор фармацевтичних наук, старший дослідник, доцент Соловйов Сергій Олександрович, e-mail: solovyov.ntape@gmail.com Лабораторні: доктор фармацевтичних наук, старший дослідник, доцент Соловйов Сергій Олександрович, e-mail: solovyov.ntape@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Посилання на дистанційний ресурс (Moodle, Google classroom, тощо)</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Предмет навчальної дисципліни – вивчення та застосування різних видів моделювання для формалізації різноманітних явищ та процесів, що спостерігаються у біологічних та медичних системах.

Мета навчальної дисципліни є формування у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

- досліджувати функціональні моделі біомедичних систем, що відтворюють певну залежність між відомими і невідомими величинами;
 - створювати моделі оптимізаційного типу, представлені системами рівнянь або нерівностей щодо невідомих параметрів моделі, мета яких полягає у пошуках такого рішення, яке б давало мінімальне значення відхилення між спостережними даними та результатами моделювання;
 - створювати та досліджувати моделі, представлені системою рівнянь з багатьма невідомими, що вимагає для їх дослідження використання потужних ЕОМ та наявності відповідних програмних засобів;
 - реалізовувати імітаційні моделі, що використовуються для аналізу складних біологічних та медичних систем і процесів, що характеризуються точним відтворенням природнього процесу або явища, потребують спеціальних розрахунків на ЕОМ;
 - досліджувати складніші системи і комплекси взаємозалежних моделей перерахованих типів.
- В результаті вивчення навчальної дисципліни здобувачі вищої освіти набудуть таких загальних програмних результатів навчання:
- розв'язувати складні задачі, пов'язані з математичним моделюванням, в галузі біології та медицини;

- проводити статистичну обробку, аналіз та узагальнення експериментальних даних із використанням програмних засобів та сучасних інформаційних технологій;
- використовувати інноваційні підходи для розв'язання складних задач біології та медицини за невизначених умов.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Навчальна дисципліна має міждисциплінарний характер та інтегрує відповідно до свого предмету спеціальні знання з інших освітніх і наукових галузей. Вона ґрунтується на знаннях, одержаних студентами при вивченні дисциплін: «Методи оптимізації», «Математична статистика», «Математичне моделювання».

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Основи моделювання хімічної кінетики біологічних процесів різного рівня.

Тема 2. Математичне моделювання ферментативного каталізу

Тема 3. Математичні моделі молекулярної рецепції

Тема 4. Основи фармакокінетики та фармакокінетична оптимізація лікування

Тема 5. Математичні моделі клітинного росту

Навчальні матеріали та ресурси

Базова література, яку треба використовувати для опанування дисципліни, опрацьовується самостійно для підготовки до лабораторних занять і в умовах дистанційного навчання. Для виконання модульних контрольних робіт, підготовки доповідей, презентацій, написання есе за результатами самостійної роботи пропонується використовувати також додаткову літературу та інтернет-ресурси.

Базова література:

1. Ingalls, B. P. (2013). *Mathematical modeling in systems biology: an introduction*. MIT press.
2. Bernhard Ø. Palsson. *Systems Biology: Simulation of Dynamic Network States*. Cambridge University Press, 2011. doi:10.1017/CBO9780511736179.

Додаткова література:

3. MASSpy: Modeling Dynamic Biological Processes in Python URL: <https://masspy.readthedocs.io/en/latest/index.html>

4. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекція 1. Основи моделювання хімічної кінетики біологічних процесів

Заплановано: Кінетичний експеримент. Визначення константи швидкості і порядку кінетичної реакції. Кінетика складних реакцій. Реєстрація, помилки та первинна обробка даних в кінетичному експерименті.

Тема самостійної роботи: Основи динамічного моделювання біологічних процесів.

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 2. Основи моделювання ферментативного каталізу

Заплановано: Кінетичні схеми та механізм ферментативної реакції. Багатосубстратні реакції. Нестационарна та релаксаційна кінетика ферментативних реакцій

Тема самостійної роботи: Основи системної біології

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 3. Дослідження факторів впливу в моделях ферментативного каталізу

Заплановано: Вплив температури та pH. Інгібітори ферментативних реакцій. Інактивація ферментів. Поліферментні системи

Тема самостійної роботи: Ферментативна кінетика у відкритих системах

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 4. Принципи моделювання молекулярної рецепції

Заплановано: Основні поняття. Молекулярні механізми рецепторних сигналів. Визначення параметрів молекулярного зв'язування

Тема самостійної роботи: Рівні представлення міжклітинної взаємодії та їх моделювання

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 5. Моделювання взаємодії лігандів та рецепторів

Заплановано: Взаємодія декількох лігандів з одним центром. Вплив різних факторів на зв'язування лігандів та рецепторів. Імітаційне моделювання при визначенні концентрації рецепторів та їх афінності.

Тема самостійної роботи: Стехіометричне моделювання біологічних процесів.

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 6. Фармакокінетичні моделі

Заплановано: Математичні моделі фармакокінетики. Фармакокінетична оптимізація лікування.

Тема самостійної роботи: Принципи регуляції живого організму

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 7. Кінетичні особливості клітинного росту

Заплановано: Експоненційна фаза росту клітинної культури. Інтегральна форма рівняння росту клітинної популяції.

Тема самостійної роботи: Модель метаболічного шляху гліколізу

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 8. Моделювання факторів впливу на клітинний рост

Заплановано: Інгібування росту клітинної популяції. Періоди індукції на кінетичних кривих росту. Зупинення росту, апоптоз та загибель клітин.

Тема самостійної роботи: Модель спряжених метаболічних шляхів

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лекція 9. Моделювання масштабованих процесів культивування клітинних популяцій

Заплановано: Моделювання процесу культивування генно-інженерних штамів мікроорганізмів. Кінетика реплікації плазмід. Культивування клітин в режимі хемостату. Комп'ютерне моделювання кінетики росту клітинних популяцій.

Тема самостійної роботи: Моделювання метаболічної мережі.

Рекомендовано: 1, 2, 3

Лабораторна робота 1. Демонстрація процедури динамічного моделювання біологічних процесів із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 2. Дослідження кінетики біохімічних реакцій із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 3. Моделювання кінетики ферментативних реакцій у закритих та відкритих системах із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 4. Стехіометричне моделювання біологічних процесів із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 5. Моделювання процесів регуляції живого організму із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 6. Моделювання метаболічного шляху гліколізу із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 7. Моделювання спряжених метаболічних шляхів із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 8. Моделювання метаболічної мережі із застосуванням мови програмування Python.

Лабораторна робота 9. Моделювання метаболізму гемоглобіну із застосуванням мови програмування Python.

5. Самостійна робота студента/студента

Самостійна робота передбачає підготовку до лекцій та лабораторних занять, до участі в обговоренні питань тем, винесених для самостійної роботи, опрацювання джерел із списку літератури тощо.

Політика та контроль

6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, поставлених перед студентом, складається з:

– обов'язкового відвідування лекцій і лабораторних занять. Відсутність і присутність на них не оцінюється в балах, але оскільки на них викладається теоретичний матеріал, надаються методичні рекомендації та розвиваються навички, необхідні для виконання контрольних завдань, то відвідування впливає на результати аудиторної і самостійної роботи, підготовку до контрольних заходів;

- оцінювання роботи на лабораторних заняттях;
- виконання МКР згідно з вимогами та критеріями оцінювання.

Слід дотримуватися правил відвідування занять.

На заняттях передбачається активність студентів, дозволяється групова форма роботи.

Вагома частина рейтингу студента формується за рахунок активної участі в роботі на лабораторних заняттях. Система оцінювання орієнтована на отримання балів за підготовку до аудиторних занять, доповідь і активність студента в обговоренні питань теми. Тому пропуск лабораторного заняття не дає студенту можливість отримати бали у семестровий рейтинг.

У разі виявлення академічної недоброчесності під час виконання модульної контрольної роботи – результати контрольного заходу не враховуються.

Повторне написання модульної контрольної роботи не допускається.

Пропущені контрольні заходи

Якщо контрольні заходи пропущені з поважних причин (хвороба або вагомі життєві обставини), студенту надається можливість виконати ці контрольні заходи протягом найближчого тижня.

Студенти, які без поважної причини були відсутні на МКР, надається можливість виконання МКР на не запланованому занятті, але в такому разі до результату будуть застосовані штрафні бали.

Заохочувальні та штрафні бали

Заохочувальні бали

Написання тез, статті, участь у міжнародних, всеукраїнських та/або інших заходах або конкурсах за тематикою навчальної дисципліни + 10 балів

Штрафні бали

Невчасне виконання МКР (на не запланованому занятті) – 5 балів

Академічна доброчесність

Політика та принципи академічної доброчесності визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Норми етичної поведінки

Норми етичної поведінки студентів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

7. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Рейтинг студента за освітній компонент складається з балів, які він отримує протягом семестру за: 1) Участь у лабораторних заняттях (9 занять); 2) Виконання МКР.

Лабораторні заняття (тах 70 балів):

Виконання лабораторного заняття та звіт оцінюється максимально у 8 балів (крім першого – у 6 балів).

Результати оголошуються кожному студенту окремо у присутності або в дистанційній формі (у Кампусі або е-поштою).

Модульна контрольна робота (2 питання по 15 балів – тах 30 балів):

15-14 балів – повна правильна відповідь на запитання або не менше 90% необхідної інформації;
13...11 балів – повна відповідь на запитання з незначними помилками/неточностями або не менше 75% необхідної інформації;

10...9 балів – майже повна відповідь з незначними помилками/неточностями або не менше 60% необхідної інформації;

0 балів – відповідь відсутня/неправильна або менше 60% необхідної інформації.

Залік:

Необхідною умовою отримання заліку є виконання та захист усіх 9 лабораторних робіт.

Сума рейтингових балів, отриманих студентом протягом семестру, переводиться до підсумкової оцінки згідно з таблицею.

Якщо сума балів менша за 60 студент виконує залікову контрольну роботу. У цьому разі бали, отримані студентом за семестр скасовується, а сума балів, отриманих за виконання залікової контрольної роботи, переводиться до підсумкової оцінки згідно з таблицею.

Студент, який у семестрі отримав більше 60 балів, але бажає підвищити свій результат, може взяти участь у заліковій контрольній роботі. У цьому разі остаточний результат складається з балів, отриманих на заліковій контрольній роботі.

Залікова контрольна робота складається з 4 питань, за кожне з яких можна отримати 25 балів (тах 100 балів):

25-23 балів – повна правильна відповідь на запитання або не менше 90% необхідної інформації;

22...19 балів – повна відповідь на запитання з незначними помилками/неточностями або не менше 75% необхідної інформації;

18...15 балів – майже повна відповідь з незначними помилками/неточностями або не менше 60% необхідної інформації;

0 балів – відповідь відсутня/неправильна або менше 60% необхідної інформації.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно

8. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

В умовах дистанційного режиму організація освітнього процесу здійснюється з використанням технологій дистанційного навчання: Slack, Telegram та «Електронний кампус». Навчальний процес у дистанційному режимі здійснюється відповідно до затвердженого розкладу навчальних занять. Заняття проходять з використанням сучасних ресурсів проведення онлайн-зустрічей (організація відеоконференцій в Zoom).

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено: доцентом кафедри прикладної математики, доктором фармацевтичних наук, старшим дослідником, доцентом С.О. Соловйовим

Ухвалено кафедрою прикладної математики (протокол № 7 від 09.02.2022 року)

Погоджено Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського (протокол № 6 від 25.03.2022 року)