

Nazwa przedmiotu KOMPLEKSY BIAŁKO-BIAŁKO I PYTHON		Kod ECTS		
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot Wydział Chemii				
Studia				
kierunek	stopień	tryb	specjalność	specjalizacja
	III	niestacjonarne		
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) Dr hab. Mieczysław Torchala				
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS	
A. Formy zajęć <ul style="list-style-type: none"> połączenie wykładu z ćwiczeniami (programowanie) 				
B. Sposób realizacji <ul style="list-style-type: none"> zajęcia w sali dydaktycznej z użyciem własnych laptopów z zainstalowanym bezpłatnym oprogramowaniem wskazanym przez prowadzącego 				
C. Liczba godzin <ul style="list-style-type: none"> samodzielne przygotowanie przed zajęciami (literatura, instalacja i zapoznanie z oprogramowaniem): 10 godz. połączenie wykładu z ćwiczeniami: 30 godz. konsultacje po zajęciach: 20 godz. 				
Cykl dydaktyczny semestr letni				
Status przedmiotu • obowiązkowy / fakultatywny		Język wykładowy polski		
Metody dydaktyczne • wykład z prezentacją multimedialną • prezentacja programowania w języku Python z komentarzem		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
		A. Sposób zaliczenia • zaliczenie z oceną		
		B. Formy zaliczenia • kolokwium pisemne z pytaniami testowymi		
		C. Podstawowe kryteria • pozytywna ocena z kolokwium pisemnego składającego się z około 10 pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych; udzielenie niektórych odpowiedzi wymaga napisania krótkich programów w języku Python (podobnych do tych napisanych w trakcie zajęć) • będzie można korzystać z wcześniej napisanych własnych programów, notatek oraz dokumentacji online • negatywną ocenę należy poprawić		
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi				
A. <u>Wymagania formalne</u> : chemia białek, podstawy informatyki				
B. <u>Wymagania wstępne</u> : podstawowe wiadomości o białkach i programowaniu				
Cele przedmiotu				
<ul style="list-style-type: none"> zapoznanie studentów z kompleksami białko-białko, dokowaniem molekularnym i strukturą plików PDB zapoznanie studentów z graficznym środowiskiem programistycznym pyCharm i podstawowymi elementami języka Python rozwijanie umiejętności programistycznych poprzez wykonywanie różnych operacji na plikach PDB pokazanie, że użyte algorytmy i struktury danych mogą być ponownie zastosowane do innych problemów, które studenci mogą napotkać w swojej pracy naukowej 				

Treści programowe

Struktura, dynamika i znaczenie biologiczne kompleksów białko-białko. Dokowanie molekularne. Format PDB. Korzystanie z graficznego środowiska programistycznego pyCharm. Podstawowe elementy języka Python (m.in. pętle, listy, krotki, słowniki, instrukcje warunkowe, czytanie i zapisywanie plików, parametry wiersza poleceń, wypisywanie na standardowe wyjście, konwersja typów) w zastosowaniu do przetwarzania plików PDB i obliczania różnorodnych wielkości takich jak odległość między atomami, geometryczne centrum cząsteczki, RMSD pomiędzy dwoma strukturami. Używanie zewnętrznych bibliotek. Tworzenie wykresów. Styl i czytelność pisanego oprogramowania.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

- M. Torchala et al., 'SwarmDock: a server for flexible protein-protein docking', *Bioinformatics* **29**, 807 (2013). DOI: 10.1093/bioinformatics/btt038.
- M. Torchala et al., 'A Markov-chain model description of binding funnels to enhance the ranking of docked solutions', *Proteins* **81**, 2143 (2013). DOI: 10.1002/prot.24369.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta przed zajęciami:

- format PDB, szczególnie pozycje elementów w rekordzie ATOM (<http://www.wwpdb.org/documentation/file-format-content/format33/sect9.html#ATOM>)
- Python:
 - http://www.cogsci.rpi.edu/~destem/igd/python_cheat_sheet.pdf
 - https://perso.limsi.fr/poital/_media/python:cours:memtopython3-english.pdf

B. Literatura uzupełniająca

Dokumentacja Python <https://www.python.org/doc/>

Oprogramowanie do zainstalowania przed zajęciami:

1. Python z różnymi pakietami: Anaconda 4.2.0 lub nowszy, dla Python 3.5 (64bit lub 32bit) (<https://www.continuum.io/downloads#windows>)
2. PyCharm Community Edition 2016.3.1 lub nowszy (<https://www.jetbrains.com/pycharm/download/#section=windows>)
3. VMD 1.9.3 lub nowszy (<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>)
4. Notepad ++ 7.2.2 lub nowszy (<https://notepad-plus-plus.org/>)

Efekty uczenia się:

SD_W01: wykazuje zaawansowaną i aktualną interdyscyplinarną wiedzę z zakresu dziedzin nauki i dyscyplin naukowych obejmujących prowadzone badania naukowe

SD_W02: wykazuje zaawansowaną wiedzę z zakresu metodologii prowadzenia badań naukowych, zasad planowania badań i ich realizacji z wykorzystaniem interdyscyplinarnych technik i narzędzi badawczych

SD_U02: biegle wykorzystuje literaturę naukową i informacje zgromadzone w bazach danych, w tym o charakterze interdyscyplinarnym, związane z działalnością naukową i dydaktyczną

SD_K01: rozumie potrzebę planowania swojego rozwoju, systematycznego aktualizowania interdyscyplinarnej wiedzy w celu poszerzania i pogłębiania własnych kompetencji

SD_K03: wykazuje krytyczne zrozumienie wkładu wyników własnej działalności badawczej w rozwój nauki

Wiedza:

1. ma ogólną wiedzę w zakresie struktury kompleksów białko-białko i dokowania molekularnego
2. ma podstawową wiedzę dotyczącą formatu plików PDB i potencjalnych problemów z niedoskonałością danych
3. zna podstawowe elementy języka Python

Umiejętności:

1. potrafi krytycznie analizować pliki PDB i przetwarzać zawarte w nich dane
2. potrafi napisać krótkie programy w języku Python, które wykonują określone zadania
3. potrafi wyszukiwać błędy we własnych i obcych programach
4. potrafi zastosować znane rozwiązania do nowych problemów, także poza pierwotnym obszarem
5. potrafi odnaleźć i krytycznie ocenić przydatność rozwiązań problemów, które są dostępne online (np. Stack Overflow, dokumentacja Pythona)

Kompetencje społeczne (postawy):

1. rozumie potrzebę ciągłego i systematycznego kształcenia się,
2. rozumie wpływ metod obliczeniowych na rozwój nauki
3. rozumie potrzebę systematycznego rozwijania umiejętności programistycznych i konieczność pisania programów w sposób zrozumiały dla innych naukowców
4. rozumie potrzebę systematycznego zapoznawania się z najnowszymi osiągnięciami dotyczącymi przewidywania struktur kompleksów białko-białko zawartych w czasopismach naukowych

Kontakt

E-mail: mieczyslaw.torchala@gmail.com

Skype: [mieczyslaw.torchala](https://www.skype.com/en/contacts/mieczyslaw.torchala)