

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

(повна назва вищого навчального закладу)

Кафедра математичного аналізу



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи

[Handwritten signature]

(П.І.Б.)

20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Комп'ютерне моделювання у біології

(назва навчальної дисципліни)

Рівень вищої освіти Магістр

Спеціальність 091 – біологія

(код і назва спеціальності (тей))

Інститут/факультет Факультет математики, фізики і інформаційних технологій

(назва інституту, факультету)

Робоча програма складена на основі навчальної програми з дисципліни
«Комп'ютерне моделювання у біології».
(назва навчальної дисципліни)

Розробники: (вказати прізвища, наукові ступені, вчені звання та посади розробників)
*Леончик Євген Юрійович, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри
математичного аналізу*

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри математичного аналізу

Протокол № 1 від "31" серпня 2020р.

Завідувач кафедри


_____ (підпис)

(А. О. Кореновський)
(прізвище та ініціали)

Схвалено навчально-методичною комісією (НМК) Факультету математики, фізики і
інформаційних технологій

Протокол № 1 від "15" 09 2020р.

Голова НМК


_____ (підпис)

(Стрижков Є.М.)
(прізвище та ініціали)

Переглянуто та затверджено на засіданні кафедри математичного аналізу

Протокол № ___ від "___" _____ 20__ р.

Завідувач кафедри

_____ (підпис)

(А. О. Кореновський)
(прізвище та ініціали)

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, спеціалізація, рівень вищої освіти	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Загальна кількість: кредитів – 3 (3 – з/в) годин – 90 (90 – з/в) залікових модулів – 2 змістових модулів – 2 ІНДЗ* – <u>Побудова математичної моделі популяції</u> (вид завдання)	Галузь знань 09 біологія (шифр і назва) Спеціальність 091 біологія (код і назва) Спеціалізації: (назва) Рівень вищої освіти: Другий (магістерський)	Обов'язкова	
		Рік підготовки:	
		1-й	1-й
		Семестр	
		2-й	2-й
		Лекції	
		10 год.	8 год.
		Практичні, семінарські	
		год.	год.
		Лабораторні	
		20 год.	16 год.
		Самостійна робота	
		60 год.	66 год.
		у т.ч. ІНДЗ*: – 6 год.	
Форма підсумкового контролю: залік			

* – за наявності

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета. В ході курсу лекцій і лабораторних занять студенти ознайомляться з математичними поняттями і популярними методами комп'ютерного моделювання, знання яких необхідне для успішного дослідження в області біології; освоють відомий пакет програм для комп'ютерного моделювання біологічних процесів.

Завдання. В процесі навчання студенти повинні освоїти основні математичні поняття і методи, які використовуються при комп'ютерному моделюванні біологічних процесів, набути навичок обробки, класифікації, аналізу і інтерпретації даних на комп'ютері.

Процес вивчення дисципліни спрямований на формування елементів відповідних компетентностей:

- ІК. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми в галузі біології при здійсненні професійної діяльності або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.
- загальних. ЗК02. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.
- спеціальних (фахових, предметних) компетентностей (СК). СК 02. Здатність формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів на прикладі різних рівнів організації живого із використанням математичних методів й інформаційних технологій.
- СК 03. Здатність користуватися сучасними інформаційними технологіями та аналізувати інформацію в галузі біології і на межі предметних галузей.
- СК 05. Здатність планувати і виконувати експериментальні роботи з використанням сучасних методів та обладнання.

Очікувані результати навчання. У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен:

ПР11. Проводити статистичну обробку, аналіз та узагальнення отриманих експериментальних даних із використанням програмних засобів та сучасних інформаційних технологій.

ПР12. Використовувати інноваційні підходи для розв'язання складних задач біології за невизначених умов і вимог.

ПР 18. Знати апаратне забезпечення, етапи проведення та теоретичні основи сучасних молекулярно-генетичних та молекулярно-біологічних методів та технологій дослідження біологічних об'єктів, які застосовуються при вирішенні прикладних проблем у сфері медико-біологічних наук та біотехнології.

3. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Комп'ютерне моделювання у *Wolfram|Alpha*

Тема 1. Комп'ютерне моделювання. Інструмент *Wolfram|Alpha*. Налаштування *Wolfram|Alpha*, елементи інтерфейсу і реєстрація користувача. Приклади.

Тема 2. Лінійне програмування в біології за допомогою *Wolfram|Alpha*. Створення віджетів.

Тема 3. Графічне відображення інформації. Рівняння Гекслі. Рівняння Берталанфі та його модифікація. Модель Лотки-Вольтерра "хижак-жертва" у пакеті *Wolfram|Alpha*. Презентація.

Змістовий модуль 2. Комп'ютерне моделювання у пакеті R

Тема 4. Пакет R для статистичної обробки даних та моделювання. Основні функції та графічне відображення інформації.

Тема 5. Використання функцій R у комп'ютерному моделюванні. Презентація моделі Бівертона-Холта.

Тема 6. Комп'ютерна модель LB-SPR за допомогою сервісу "Bare Foot Ecologist".

4. Структура навчальної дисципліни

Назви тем	Кількість годин									
	Денна форма					Заочна форма				
	Усього	у тому числі				Усього	у тому числі			
		л	п/с	лаб	ср		л	п/с	лаб	ср
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Змістовий модуль 1. Комп'ютерне моделювання у <i>Wolfram Alpha</i>										
Тема 1	15	2		2	10	13	1		2	10
Тема 2	15	2		4	10	13	1		2	10
Тема 3	15	2		2	10	16	2		4	10
Разом за змістовим модулем 1	45	6		8	30	42	4		8	30
Змістовий модуль 2. Комп'ютерне моделювання у пакеті R										
Тема 4	15	2		4	10	13	1		2	10
Тема 5	15	2		4	10	13	1		2	10
Тема 6	15			4	10	16	2		4	10
Разом за змістовим модулем 2	45	4		12	30	42	4		8	30
ІНДЗ*					6					6
Усього годин	90	10		20	60	90	8		16	66

* – за наявності

5. Теми семінарських занять

Не передбачено.

6. Теми практичних занять

Не передбачено.

7. Теми лабораторних занять

На лабораторних заняттях студенти освоюють роботу у *Wolfram|Alpha* та у пакеті *R*; виконують завдання по відповідних темах, які наведені нижче.

№ з/п	Назва теми/ види завдань	Кількість годин	
		Денне відділення	Заочне відділення
1	Теоретичні та методологічні основи моделювання в біології. Принципи моделювання біологічних систем, явищ і процесів. Інструмент <i>Wolfram Alpha</i> . Налаштування <i>Wolfram Alpha</i> , елементи інтерфейсу і реєстрація користувача. Синтаксис команд. Приклади.	2	2
2	Лінійне програмування в біології за допомогою <i>Wolfram Alpha</i> . Створення віджетів.	4	4
3	Графічне відображення інформації. Рівняння Гекслі. Рівняння Берталанфі та його модифікація. Приклади використання математичних методів для моделювання конкретних біологічних процесів. Модель Лотки-Вольтерра "хижак-жертва" у пакеті <i>Wolfram Alpha</i> .	2	2
4	Використання функцій у пакеті <i>R</i> . Введення і виведення даних. Структура об'єкта. Читання таблиці. Відбір даних. Запис файлу. Побудова графіків.	4	4
5	Використання функцій <i>R</i> у комп'ютерному моделюванні. Функція <i>nls</i> (нелінійні найменші квадрати) для пошуку параметрів моделі.	4	2
6	Оцінка вектора природної смертності. <i>LB-SPR</i> модель за допомогою сервісу "Bare Foot Ecologist"	4	2
	Разом	20	16

8. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми/ види завдань	Кількість годин	
		Денне відділення	Заочне відділення
1	Комп'ютерне моделювання. Інструмент <i>Wolfram Alpha</i> . Налаштування <i>Wolfram Alpha</i> , елементи інтерфейсу і реєстрація користувача.	10	11

	Синтаксис команд.		
2	Лінійне програмування в біології за допомогою <i>Wolfram Alpha</i> . Створення віджетів.	10	11
3	Графічне відображення інформації. Рівняння Гекслі. Рівняння Берталанфі та його модифікація. Модель Лотки-Вольтерра "хижак-жертва" у пакеті <i>Wolfram Alpha</i> .	10	11
4	Використання функцій у пакеті R. Введення і виведення даних. Структура об'єкта. Читання таблиці. Відбір даних. Запис файлу. Побудова графіків.	10	11
5	Використання функцій R у комп'ютерному моделюванні. Функція nls (нелінійні найменші квадрати) для пошуку параметрів моделі.	10	11
6	Поняття коефіцієнту природної смертності M та поповнення. Оцінка вектору природної смертності. LB-SPR модель за допомогою сервісу "Bare Foot Ecologist".	10	11
	Разом	60	66

До самостійної роботи відноситься:

- [1] – підготовка до лекцій та лабораторних занять;
- [2] – виконання домашнього завдання.

9. Індивідуальне навчально-дослідне завдання

Студент виконує індивідуальне завдання, у якому потрібно провести обчислення та моделювання популяції за встановленою схемою. Кількість годин – 6.

10. Методи навчання

Метод проблемного викладення (наукового пошуку)

Пояснювально-ілюстративні методи:

- лекція
- пояснення
- інструктаж
- самостійне опрацювання літературних джерел
- робота з електронними конспектами лекцій та презентаціями

Інформаційно – повідомляючий метод

Наочні методи(презентації, ілюстрації)

Репродуктивні методи:

- закріплення вивченого на основі зразка (побудова моделей, розв'язування задач)
- розв'язування задач за алгоритмами конкретних методів
- вправи
- лабораторні роботи
- практичні роботи

Дослідницький метод

Методи формування і стимулювання пізнавальної діяльності:

- пізнавальні ігри
- навчальні дискусії
- аналіз життєвих ситуацій

11. Методи контролю

Методи усного контролю:

- фронтальне і індивідуальне усне опитування
- усний залік

Методи письмового контролю:

- письмові самостійні і контрольні роботи на ПК
- тести, письмовий залік на ПК

12. Питання для підсумкового контролю

Навести перелік питань

1. Чим біоінформатика відрізняється від біоніки та біокібернетики?
2. Що означає термін аналогія? Які види аналогії можна вказати?
3. Дайте визначення моделі. Як аналогія використовується в моделюванні?
4. Які типи моделювання існують? Чим вони відрізняються?
5. Що таке модельний експеримент?
6. У чому полягає специфіка уявного експерименту?
7. Як співвідносяться комп'ютерний експеримент та імітаційне моделювання?
8. У чому полягають особливості моделювання в біології?
9. Які напрямки математики використовуються для моделювання біологічних процесів?
10. У чому проявляється особливість біологічного додатки методів дискретної математики?
11. Що таке моделі даних і моделі систем?
12. Які інформаційні технології застосовуються для моделювання у біології?
13. Що таке біометрія? Чим вона відрізняється від математичної статистики?
14. Що таке теорія оптимального експерименту?
15. Яке програмне забезпечення використовується для статистичної обробки біологічних досліджень?
16. У чому полягають особливості застосування біометричних моделей у генетичних дослідженнях?
17. Що таке науково-доказова медицина та біологія?
18. У яких біологічних завданнях використовується лінійне програмування?
19. Що таке теоретико-інформаційна міра оцінки невизначеності?
20. Що являють собою таблиці спряженості ознак? У яких видах аналізу вони використовуються?
21. Що таке математична екологія?
22. Як формулюється найпростіша модель Вольтерра-Лотки? Що таке модель «хижак - жертва»?

23. Які математичні методи використовуються для генної реконструкції філогенезу популяцій людини?
24. У чому специфіка системи *Wolfram|Alpha*?
25. Які біологічні задачі можна вирішувати за допомогою системи *Wolfram|Alpha*?
26. Чим займається нейроінформатика як наука?
27. Які особливості штучного нейрона? Чим він схожий з природним (біологічним) нейроном? У чому полягає різниця вхідні, вихідні та проміжні нейрони?
28. Що являє собою передавальна функція? З чого складаються нейронні мережі? Де вони використовуються?
29. У чому переваги мереж із зворотними зв'язками в порівнянні з мережами прямого поширення? Які є стратегії навчання нейронних мереж? У чому їх відмінності?
30. Що спільного у природних і комп'ютерних вірусів і в чому їх відмінності?
31. Коли і як виникли комп'ютерні віруси?

Побудувати комп'ютерну модель LB-SPR, що описує поточний стан популяції за даними розмірно-вікового складу.

13. Розподіл балів, які отримують студенти

Критерії та шкала оцінювання: національна та ECTS

Реалізація основних завдань контролю знань здобувачів вищої освіти в ОНУ досягається системними підходами до оцінювання та комплексністю застосування різних видів контролю. Згідно з діючою в університеті системою комплексної діагностики знань здобувачів вищої освіти, з метою стимулювання планомірної та систематичної навчальної роботи, оцінка знань здійснюється за 100-баловою системою, яка переводиться відповідно у національну шкалу («відмінно», «добре», «задовільно», «незадовільно») та шкалу європейської кредитно-трансферної системи (ЄКТС – А, В, С, D, E, FX, F).

За системою ОНУ	За шкалою ECTS	За національною системою	Визначення
90-100	A	5 (відмінно)	Повно та ґрунтовно засвоїв всі теми навчальної програми вміє вільно та самостійно викласти зміст всіх питань програми навчальної дисципліни, розуміє її значення для своєї професійної підготовки, повністю виконав усі завдання кожної теми та поточного модульного контролю в цілому.
85-89	B	4 (дуже добре)	Недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв окремі питання робочої програми. Вміє

			самостійно викласти зміст основних питань програми навчальної дисципліни, виконав завдання кожної теми та модульного поточного контролю в цілому.
75-84	C	4 (добре)	Недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв деякі теми робочої програми, не вмів самостійно викласти зміст деяких питань програми навчальної дисципліни. Окремі завдання кожної теми та модульного поточного контролю в цілому виконав не повністю.
70-74	D	3 (задовільно)	Засвоїв лише окремі теми робочої програми. Не вмів вільно самостійно викласти зміст основних питань навчальної дисципліни, окремі завдання кожної теми модульного контролю не виконав.
60-69	E	3 (достатньо)	Засвоїв лише окремі питання навчальної програми. Не вмів достатньо самостійно викласти зміст більшості питань програми навчальної дисципліни. Виконав лише окремі завдання кожної теми та модульного контролю в цілому.
35-59	FX	2 (незадовільно)	Не засвоїв більшості тем навчальної програми не вмів викласти зміст більшості основних питань навчальної дисципліни. Не виконав більшості завдань кожної теми та модульного контролю в цілому.
0-34	F	2 (незадовільно)	Не засвоїв навчальної програми, не вмів викласти зміст жодної теми навчальної дисципліни, не виконав модульного контролю, з обов'язковим повторним вивченням дисципліни.

Орієнтовний приклад для заліку

Поточний контроль								Модульний контроль	Сума балів
Змістовий модуль №1				Змістовий модуль № 2					
T1	T2	T3		T4	T5	T6		20+20	100
10	10	10		10	10	10			

T1, T2 ... T6 – теми змістових модулів

14. Методичне та матеріально-технічне забезпечення

1. Математическое и компьютерное моделирование в биологии : учеб.-метод. пособие / С. Е. Дромашко. – 2009. – 65 с.
2. Довідкова інформація на сайтах Wolfram|Alpha та The Barefoot Ecologist's Toolbox :
 - Первинні дані для комп'ютерного моделювання;
 - Значення усіх необхідних параметрів та коефіцієнтів;
 - Інструкції до програмного забезпечення та приклади розрахунків.

Матеріальне забезпечення: комп'ютери з програмним середовищем R, доступ до мережи інтернет.

15. Рекомендована література

Основна

1. А.Б. Шипунов, Е.М. Балдин, П.А. Волкова и др.: Наглядная статистика. Используем R! – М.: ДМК Пресс, 2012. – 298 с.
2. Understanding Statistics Using R / Randall Schumacker, Sara Tomek. – Springer New York. – 2013. Безкоштовне завантаження на сайті Springer:
<http://link.springer.com/openurl?genre=book&isbn=978-1-4614-6227-9>
3. Hordyk A., Ono K., Sainsbury K., Loneragan N., and Prince J. Some explorations of the life history ratios to describe length composition, spawning per recruit, and the spawning potential ratio // ICES J. Mar. Sci., vol. 72 (1). – 2015. – pp. 204-216.

Додаткова

1. Methods of Mathematical Modelling / Thomas Witelski, Mark Bowen. – Springer New York. – 2015. Безкоштовне завантаження на сайті Springer:
<http://link.springer.com/openurl?genre=book&isbn=978-3-319-23042-9>
2. Modeling Life / Alan Garfinkel, Jane Shevtsov, Yina Guo. – Springer New York. – 2017. Безкоштовне завантаження на сайті Springer:
<http://link.springer.com/openurl?genre=book&isbn=978-3-319-59731-7>
3. Інформаційне забезпечення до комп'ютерних програм, яке міститься у відповідних файлах-довідках.

16. Електронні інформаційні ресурси

1. www.r-project.org
2. <http://www.wolframalpha.com/>
3. <http://barefootecologist.com.au>

ПЛАН ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

По дисципліні – «Комп'ютерне моделювання у біології»

Факультет – біологічний

Лекційних – 10 години

Лабораторних – 20 годин

Всього – 90 годин.

Викладач:

доц. каф. математичного аналізу Леончик Є.Ю.

ПЛАН ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

Змістовий модуль 1. Комп'ютерне моделювання у *Wolfram|Alpha*.

Питання для підготовки та обговорення:

1. Порівняльний аналіз цілей, завдань і методів біоінформатики, біоніки і біокібернетики.
2. Аналогія і моделювання в біологічних дослідженнях.
3. Порівняння методів фізичного і математичного моделювання.
4. Моделювання в біології та комп'ютерний експеримент.
5. Моделі даних і моделі систем.
6. Ефективність методів дискретної математики для аналізу різних біологічних систем.
7. Основні біологічні напрямки використання теоретико-інформаційного підходу.
8. Лінійне програмування в біології та медицині.
9. Основні етапи становлення математичної екології.
10. Нейроінформатика і нейрокомп'ютинг.
11. Експериментальне дослідження проблеми штучного інтелекту.
12. Віруси *in vivo* та *in silico*: порівняльний аналіз.

Контрольні питання:

32. Чим біоінформатика відрізняється від біоніки та біокібернетики?
33. Що означає термін аналогія? Які види аналогії можна вказати?
34. Дайте визначення моделі. Як аналогія використовується в моделюванні?
35. Які типи моделювання існують? Чим вони відрізняються?
36. Що таке модельний експеримент?
37. У чому полягає специфіка уявного експерименту?
38. Як співвідносяться комп'ютерний експеримент та імітаційне моделювання?
39. У чому полягають особливості моделювання в біології?
40. Які напрямки математики використовуються для моделювання біологічних процесів?
41. У чому проявляється особливість біологічного додатки методів дискретної математики?
42. Що таке моделі даних і моделі систем?
43. Які інформаційні технології застосовуються для моделювання у біології?
44. Що таке біометрія? Чим вона відрізняється від математичної статистики?
45. Що таке теорія оптимального експерименту?
46. Яке програмне забезпечення використовується для статистичної обробки біологічних досліджень?
47. У чому полягають особливості застосування біометричних моделей у генетичних дослідженнях?
48. Що таке науково-доказова медицина та біологія?
49. У яких біологічних завданнях використовується лінійне програмування?
50. Що таке теоретико-інформаційна міра оцінки невизначеності?

51. Що являють собою таблиці спряженості ознак? У яких видах аналізу вони використовуються?
52. Що таке математична екологія?
53. Як формулюється найпростіша модель Вольтерра-Лотки? Що таке модель «хижак - жертва»?
54. Які математичні методи використовуються для генної реконструкції філогенезу популяцій людини?
55. У чому специфіка системи *Wolfram|Alpha*?
56. Які біологічні задачі можна вирішувати за допомогою системи *Wolfram|Alpha*?
57. Чим займається нейроінформатика як наука?
58. Які особливості штучного нейрона? Чим він схожий з природним (біологічним) нейроном? У чому полягає різниця вхідні, вихідні та проміжні нейрони?
59. Що являє собою передавальна функція? З чого складаються нейронні мережі? Де вони використовуються?
60. У чому переваги мереж із зворотними зв'язками в порівнянні з мережами прямого поширення? Які є стратегії навчання нейронних мереж? У чому їх відмінності?
61. Що спільного у природних і комп'ютерних вірусів і в чому їх відмінності? Коли і як виникли комп'ютерні віруси?

Література:

1. Математическое и компьютерное моделирование в биологии : учеб.-метод. пособие / С. Е. Дромашко. – 2009. – 65 с.
2. <http://www.wolframalpha.com/>
3. Methods of Mathematical Modelling / Thomas Witelski, Mark Bowen. – Springer New York. – 2015. Безкоштовне завантаження на сайті Springer: <http://link.springer.com/openurl?genre=book&isbn=978-3-319-23042-9>

Змістовий модуль 2. Комп'ютерне моделювання у пакеті R

Питання для підготовки та обговорення:

1. Використання функцій R у комп'ютерному моделюванні.
2. Функція `nls` (нелінійні найменші квадрати) для пошуку параметрів моделі.
3. Введення і виведення даних. Структура об'єкта. Читання таблиці. Відбір даних. Запис файлу.
4. Побудова графіків в R.
5. Рівняння Гекслі в R.
6. Рівняння Берталанфі та його модифікація в R.
7. Оцінка вектору природної смертності.
8. Основна схема моделі LB-SPR.
9. Структура DAT файлу LB-SPR.
10. Інтерпретація результатів обчислення LB-SPR.

Контрольні питання:

1. Синтаксис R та основні операції.

2. Як побудувати графіки в R?
3. Перерахувати основні функції для обробки даних та надати їх синтаксис.
4. Привести приклад використання функції `pls` для розрахунків коефіцієнтів рівняння Гекслі.
5. Привести приклад використання функції `pls` для розрахунків коефіцієнтів рівняння Берталанфі.
6. Як розрахувати коефіцієнт природної смертності в R?
7. Побудувати комп'ютерну модель LB-SPR, що описує поточний стан популяції за даними розмірно-вікового складу.
8. Навести усі параметри моделі LB-SPR та дати їх опис.
9. Що відображає SPR графік моделі LB-SPR?
10. Що відображає F/M графік моделі LB-SPR?
11. Як зберегти результати обчислення у табличному та графічному форматах?
12. Сформулювати переваги та недоліки методу LB-SPR.

Література:

1. А.Б. Шипунов, Е.М. Балдин, П.А. Волкова и др.: Наглядная статистика. Используем R! – М.: ДМК Пресс, 2012. – 298 с.
2. Understanding Statistics Using R / Randall Schumacker, Sara Tomek. – Springer New York. – 2013. Безкоштовне завантаження на сайті Springer:
<http://link.springer.com/openurl?genre=book&isbn=978-1-4614-6227-9>
3. Hordyk A., Ono K., Sainsbury K., Loneragan N., and Prince J. Some explorations of the life history ratios to describe length composition, spawning per recruit, and the spawning potential ratio // ICES J. Mar. Sci., vol. 72 (1). – 2015. – pp. 204-216.
4. www.r-project.org
5. <http://barefootecologist.com.au>