

Moleculaire simulaties bij biosystemen (C002727)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 3.0

Studietijd 80 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2025-2026

A (semester 1)

Engels

Gent

hoorcollege

werkcollege

Lesgevers in academiejaar 2025-2026

Verstraelen, Toon

WE05

Verantwoordelijk lesgever

Savvides, Savvas

WE10

Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2025-2026

Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting biochemie en biotechnologie)

stptn

aanbodsessie

3

A

Master of Science in Biochemistry and Biotechnology

3

A

Uitwisselingsprogramma biochemie en biotechnologie (niveau master)

3

A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

Proteïnes en DNA, moleculaire dynamica, krachtvelden, kwantificering van onzekerheid, principale componentenanalyse, high performance computing

Situering

De uiteindelijke functie van biologische macromoleculen wordt bepaald door hun driedimensionale structuur en dynamica. Met moleculaire simulaties is het mogelijk om deze microscopische eigenschappen te onderzoeken en de berekende grootheden te linken aan macroscopische grootheden, zoals thermodynamische eigenschappen. Moleculaire modellering wordt steeds meer aangewend als waardevol hulpmiddel door biologen en (bio)scheikundigen. De immer toenemende computercapaciteiten hebben deze simulaties toegankelijk gemaakt voor eindgebruikers. Daarnaast bieden computersimulaties het voordeel dat ze op (relatief) goedkope manier een antwoord kunnen formuleren op fundamenteel wetenschappelijke vragen, zonder dat daarvoor vele (dure) scheikundige reacties of zuiveringen nodig zijn. Binnen de academische wereld maar zeker ook in industrie wordt modellering dan ook veelvuldig toegepast op biomoleculen, zoals eiwitten, polynucleotiden, farmaceutische producten, pesticiden, etc. Competentiecodes: Ma.WE.BB.1.1, Ma.WE.BB.1.3, Ma.WE.BB.2.1, Ma.WE.BB.2.4, Ma.WE.BB.2.6, Ma.WE.BB.3.2, Ma.WE.BB.3.5, Ma.WE.BB.4.3, Ma.WE.BB.6.1

Inhoud

In de hoorcolleges worden de principes behandeld die aan de basis liggen van technieken die zullen worden aangewend in de praktische sessies. Er wordt gestreefd naar begrip, niet naar reproductie. Bovendien worden de hoorcolleges zo gestructureerd dat ze integraal in het teken staan van de computationele toepassingen. In de praktische sessies wordt gebruik gemaakt van gangbare pakketten in het vakgebied: OpenMM, Jupyter Notebooks, NGLView, VMD, ... – allen vrij beschikbaar voor academische gebruikers.

1 Constructie van een moleculair model: structuur van een pdb-file, visualisatie

2 Beschrijving van atomaire/moleculaire interacties in biomoleculaire systemen: klassiek (forcefields)

3 Moleculaire dynamica: minimalisatie, equilibratie, annealing

4 Analyse van dynamica: energiecontributies, foutenschatting, RMSD, principale componentenanalyse

Studenten voeren hun berekeningen uit in het VSC Tier-2 high performance cluster aan de Universiteit Gent.

Begincompetenties

Basiskennis (bio)chemie en programmeren in Python

Eindcompetenties

- 1 Recente wetenschappelijke literatuur begrijpen en de beschreven simulaties reproduceren. Gangbare methodes toepassen in eigen onderzoek.
- 2 Zelfstandig een simulatie opzetten met een computerprogramma en een zinvolle analyse uitvoeren.
- 3 Rechtstreeks kunnen aansluiten bij courant onderzoek in binnen- of buitenlandse onderzoeksgroepen.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

De theorielessen worden in de vorm van hoorcolleges gegeven.
Werkcolleges bestaan uit het onder begeleiding en zelfstandig oplossen van computationele projecten waarbij de theorie wordt toegepast.

Studiemateriaal

Type: Slides

Naam: Moleculaire simulaties bij biosystemen
Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
Optioneel: nee
Taal : Engels
Aantal slides : 160
Beschikbaar op Ufora : Ja
Online beschikbaar : Ja
Beschikbaar in de bibliotheek : Nee
Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Type: Andere

Naam: OpenMM tutorial for the MSBS course
Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
Optioneel: nee
Taal : Engels
Auteur : Jelle Vekeman en Toon Verstraelen
Beschikbaar op Ufora : Nee
Online beschikbaar : Ja
Beschikbaar in de bibliotheek : Nee
Beschikbaar via studentenvereniging : Nee
Gebruik en levensduur binnen het opleidingsonderdeel : niet van toepassing
Gebruik en levensduur binnen de opleiding : intensief
Bijkomende info: <https://github.com/molmod/openmm-tutorial-msbs>

Referenties

Martin J. Field, "A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems",
Cambridge University Press
Andreas Kukol, "Molecular Modeling of Proteins", Humana Press

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Onder begeleiding oplossen van computationele projecten. Mogelijkheid tot vraagstelling voor, tijdens en na de les, en online.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Projectwerk. Een schriftelijke neerslag is vereist en het werk dient te worden verdedigd in een korte presentatie.

Eindscoreberekening

100% projectwerk

Faciliteiten voor werkstudenten

Geen extra faciliteiten