

Moleculaire modellering voor de geneeskunde en biomedische ingenieurswetenschappen (E074500)

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

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodsessies in academiejaar 2025-2026

A (semester 1)

Engels

Gent

Lesgevers in academiejaar 2025-2026

Mehdipour, Ahmadreza

TW17

Verantwoordelijk lesgever

Ghysels, An

TW06

Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2025-2026

Master of Science in Biomedical Engineering

stptn

aanbodssessie

6

A

Master of Science in de ingenieurswetenschappen: biomedische ingenieurstechnieken

6

A

Onderwijsstalen

Engels

Trefwoorden

Nanoscale modellering, moleculaire-dynamica-simulaties, computationele medicijnontwikkeling, systemen voor geneesmiddelen-toediening, machine learning

Situering

Computationele modellering van biomedische processen zoals de geneesmiddel-doelwit-interactie is een van de opkomende gebieden in de biogeneeskunde. Het biedt een aanvullend en kwantitatief instrument naast het experimentele werk dat mogelijk beperkt is qua resolutie in tijd en ruimte. Moleculaire-dynamica-simulaties en op machine learning gebaseerde benaderingen zijn krachtige methoden voor het bestuderen van biomedische vraagstukken. Deze cursus behandelt de basisprincipes van deze computationele methoden en hun toepassing in de biogeneeskunde.

Inhoud

- 1 Introductie tot modellering op de moleculaire schaal
- 2 Geneesmiddelenontwikkeling
 - 1 Inleiding tot de structurele biologie
 - 2 Inleiding tot statistische mechanica
- 3 Moleculaire-dynamica-simulaties
- 4 Berekening van vrije energie en alchemische transformatie
- 5 Docking
- 6 Machine Learning/Kunstmatige Intelligentie
- 7 Modellering met grovere schalen (coarse-graining)
- 8 Toepassingen met coarse-grained-simulaties:
 - geneesmiddelenafgiftesystemen
- 3 Kinetiek van levensprocessen
 - Theorie over diffusie en transport
 - Geavanceerde bemonsteringsmethoden (sampling)
 - Toepassing van kinetische methodes: membraantransport

Begincompetenties

De studenten hebben vakken gevolgd in: moleculaire structure, thermodynamics en statistische mechanica. Ze hebben een basis en ervaring in het werken met computers en programmeren.

Eindcompetenties

- 1 De student beheerst de basisprincipes van moleculaire-dynamica-simulaties en coarse-grained-methoden.
- 2 De student is in staat om verschillende Machine Learning en Kunstmatige Intelligentie methoden te gebruiken in het kader van moleculaire modellering en geneesmiddelontwerp.
- 3 De student kan verschillende computerprogramma's toepassen om een biomoleculair systeem te modelleren met behulp van geschikte simulatiemethoden en high-performance computing-infrastructuur.
- 4 De student kan simulatieresultaten kritisch analyseren en interpreteren en heeft een grondig begrip van de sterke en zwakke punten van toegepaste modelleringsbenaderingen.
- 5 De student kan projectresultaten zowel schriftelijk als mondeling presenteren en deze kritisch beoordelen.

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, Zelfstandig werk

Studiemateriaal

Geen

Referenties

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Presentatie, Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

- Schriftelijk examen
- Opgave in praktische sessies
- Presentatie-opdracht (individueel of in groep)

Eindscoreberekening