

Sinopse Synopsis

Unidade Curricular:
Curricular Unit: Simulação Bioquímica

Docente Responsável
Responsible academic staff member:
António Eduardo do Nascimento Ferreira

Conteúdos programáticos:

O interesse da simulação em bioquímica: a importância das abordagens integradoras, o conceito de modelo, os limites conceptuais dos modelos. A simulação em vários níveis de complexidade: modelos de base discreta ou contínua, modelação cinética ou molecular, modelos cinéticos metabólicos, farmacocinéticos e populacionais. Metodologias de construção de modelos. Análise numérica e simbólica de FDE's e ODEs. Análise estequiométrica e de sensibilidade. Métodos de Modelação Molecular: Princípios de Mecânica molecular. Definição e parameterização de campos de força. Optimização de estrutura. Dinâmica Molecular e Monte Carlo. Docking Molecular.

Teórico-práticas: análise detalhada de um conjunto representativo de exemplos de simulação em ciências biológicas. Uso de software de simulação: PLAS ou SBW e GROMACS.

Syllabus:

The interest of simulation in Biochemistry: importance of integrative approaches, the concept of model, the limits of models. Simulation in different levels of complexity: discrete and continuous modelling, kinetic and molecular modeling. Kinetic modelling: metabolic, pharmacokinetic and at population level. Methodologies used in simulation: model development. Symbolic and numerical analysis of FDEs and ODEs. Stoichiometric and sensitivity analysis. Molecular Modeling Methods: Principles in Molecular Mechanics, Force Fields: definition and parameterization, Structure optimization, Molecular Dynamics and Monte Carlo methods, Molecular Docking.

Theoretical-practical classes: Detailed analysis of a set of representative examples. Use of simulation software: PLAS or SBW and GROMACS.

Objectivos da unidade curricular e competências a adquirir:

Nesta disciplina pretende-se que os estudantes desenvolvam conhecimentos fundamentais na área emergente do estudo de Sistemas em Biologia, com ênfase especial nos aspectos de modelação e simulação cinética de base computacional. Adicionalmente, pretendendo-se que sejam adquiridos conhecimentos fundamentais dos vários aspectos relacionados com os métodos de simulação molecular de detalhe atómico.

Objectives of the curricular unit and competencies to be acquired:

In this unit, students should develop basic knowledge in the emerging field of Systems Biology, focusing on computer aided modelling and simulation in Biochemistry. Additionally, in this unit the students should become familiar with the methodologies of molecular simulation using models of atomic (semi-classic) detail.

Bibliografia principal:

Kaplan, D. Glass, L. (1995) Understanding nonlinear dynamics, Springer.
Murray, J.D. (1993) Mathematical Biology, 2nd Ed. Springer.

Keener, J., Sneyd, J. (1988) *Mathematical Physiology*, Springer.
Hargrove, J. L. (1998) *Dynamic Modelling in the Health Sciences*, Springer.
Voit, E. O. (2000) *Computational Analysis of Biochemical Systems*, Cambridge Univ. Press.

Main Bibliography:

Kaplan, D. Glass, L. (1995) *Understanding nonlinear dynamics*, Springer.
Murray, J.D. (1993) *Mathematical Biology*, 2nd Ed. Springer.
Keener, J., Sneyd, J. (1988) *Mathematical Physiology*, Springer.
Hargrove, J. L. (1998) *Dynamic Modelling in the Health Sciences*, Springer.
Voit, E. O. (2000) *Computational Analysis of Biochemical Systems*, Cambridge Univ. Press.

Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Aulas presenciais com forte componente computacional, análise de exemplos em grupo com discussão colectiva. Monografia sobre análise de um artigo fornecido com apresentação oral na aula. Exame final oral.

Teaching methodologies (including evaluation):

Lectures with emphasis on computational and interactive approaches, comprising analysis of simulation case studies by groups of students with full class discussion. Monograph and presentation discussing a scientific article on simulation. Final oral exam.