

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
Навчально-науковий інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
Заступник директора  
з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«24» травня 2022 року

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Біоінформатика

(повна назва дисципліни)

для студентів

галузь знань

**№10 «Природничі науки»**

(шифр і назва)

спеціальність

**105 «Прикладна фізика та наноматеріали»**

(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень

**бакалавр**

(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)

освітня програма

**Нанофізика та комп'ютерні технології**

(назва освітньої програми)

вид дисципліни

вибіркова

Форма навчання

денна

Навчальний рік

2022/2023

Семестр

8

Кількість кредитів ECTS

4.0

Мова викладання, навчання  
та оцінювання

українська

Форма заключного контролю

іспит

Викладач: Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики  
Нипорко Олексій Юрійович, к.б.н., доц., зав. кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

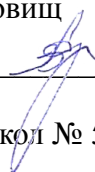
Розробники:

Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

Нипорко Олексій Юрійович, к.б.н., доц., зав. кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

**ЗАТВЕРДЖЕНО**

Зав. кафедри нанофізики конденсованих середовищ



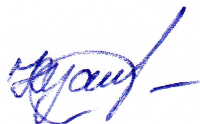
Валерій Скришевський

Протокол № 5 від «19» квітня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією інституту високих технологій

Протокол від «13» травня 2022 року № 4

Голова науково-методичної комісії



Русінчук Н. М.

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з відомими методами та програмними засобами біоінформатики для розв'язання біологічних та біотехнологічних задач та оволодіння підходами до моделювання процесів у природі, навичками використання сучасних типових числових методів та сучасних програмних середовищ.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

1. Мати базові знання з молекулярної біології, органічної хімії та біофізики.
2. Вміти програмувати, знати реалізації комп'ютерних алгоритмів.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Предмет навчальної дисципліни охоплює вивчення як загальної, так і прикладної біоінформатики – як окремої та повноцінної дисципліни, що бурхливо розвивається в Україні і має безпосереднє відношення до аналізу результатів геномних досліджень. На основі інформації про первинну і просторову структуру білків, нуклеїнових кислот формування та їх можливих ефекторів буде розглянуто особливості використання основних баз даних молекулярно-біологічної інформації, спеціалізованого програмного забезпечення, основних методів біоінформатики та молекулярного моделювання, що використовуються в сучасній біології та біотехнології.

Протягом курсу буде проведено короткий огляд основних методів, он-лайн інструментів та програмного забезпечення, що використовуються у біоінформатичних дослідженнях, зокрема детально розглядаються найбільш поширені підходи реконструкції та верифікації просторової структури макромолекулярних комплексів для розв'язання практичних задач біотехнології.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

*Навчання дисципліни має на меті розвивати у студентів такі компетентності:*

ЗК 1 Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 2 Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК 5 Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК 6 Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК 9 Здатність працювати автономно.

ЗК 13 Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями, уміннями, у тому числі в сфері, відмінної від професійної.

ЗК 14 Здатність бути критичним і самокритичним.

ЗК 17 Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ФК 1 Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів.

ФК 2 Здатність брати участь у плануванні і виконанні експериментів та лабораторних досліджень властивостей фізичних систем, фізичних явищ і процесів, обробленні й презентації їхніх результатів.

ФК 5 Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій.

ФК 6 Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем.

ФК 7 Здатність використовувати методи і засоби теоретичного дослідження та математичного моделювання в професійній діяльності.

ФК11 Здатність використовувати комп'ютерні технології при проектуванні, розробці та діагностиці електронного обладнання.

### 5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати терміни, поняття та методи, що використовуються у молекулярному моделюванні, розуміти межі їх застосовності, точність. Розрізняти бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації.	Лекції	Модульна контрольна робота	15%
1.2	Знати основні методи та принципи динамічності та перебудови молекул, що використовуються для вивчення міжмолекулярних взаємодій біополімерів та їх систем, розуміти межі їх застосовності, точність.	Лекції	Модульна контрольна робота	15%
1.3	Знати основні методи ресурсоємних обчислень, що застосовуються для моделювання поведінки мікро- та макромолекулярних комплексів в наближених до клітинних умов середовищі, розуміти межі їх застосовності, точність.	Лекції	Модульна контрольна робота	15%
1.4	Знати перелік задач сучасної біотехнології, до розв'язання яких застосовуються специфічні біоінформатичні методи чи алгоритми	Самостійна робота студента	Питання на модульній контрольній роботі	6%
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розв'язання задач структурної біології та біоінформатики та створювати комп'ютерні моделі реальних об'єктів та процесів.	Практичні роботи, самостійна робота студента	Домашні самостійні завдання	9%
3.1	Вміти донести інформацію про постановку задач сучасної структурної біології та біоінформатичні методи їх розв'язання до аудиторії.	Самостійна робота студента	Усна відповідь на підсумковій контрольній	10%
4.1	Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору методу.	Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента	Розв'язання задачі на підсумковій контрольній	30%

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	3.1	4.1
<b>Програмні результати навчання</b>							
ПР1 Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.	+	+	+	+		+	+
ПР2 Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів.			+		+	+	+
ПР4 Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій.		+	+	+	+	+	+
ПР6 Відшукувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації.		+	+	+	+	+	+
ПР7 Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики	+			+	+	+	+
ПР10 Планувати й організувати результативну професійну діяльність індивідуально і як член команди при розробці та реалізації наукових і прикладних проєктів.		+			+	+	+
ПР15 Розробляти та формулювати свої професійні висновки та розумно їх аргументувати для фахової та нефахової аудиторії.					+	+	+
ПР16 Оцінювати важливість матеріалів для досягнення цілей наукового дослідження в галузі прикладної фізики зі спеціалізацією в сфері нанофізики.				+	+	+	+
ПРН 19-1 На основі отриманих знань проєктувати електронні прилади та програмне забезпечення для потреб нанотехнологій.	+	+	+	+	+		
ПРН 20-1. Діагностувати та удосконалювати існуючі електронні прилади та прикладні комп'ютерні програми, що використовуються в природничих науках.	+	+	+	+	+		

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання:

1. Модульні контрольні роботи (3 роботи): 10 балів/7 бали. (30 макс 21 мін)

2. Домашні самостійні завдання (9 робіт): 1 бал/0 бали (09 макс 0 мін)

3. Підсумкова контрольна робота: 21 бали/15 балів (21 макс 15 мін)

Усього: 100 балів/60 балів.

#### - підсумкове оцінювання: іспит 40/24

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Іспит	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

### 7.2 Організація оцінювання:

Оцінювання 3х контрольних робіт та самостійних завдань наведена у таблицях вище. Загалом максимальна кількість балів, яку студент може отримати за виконання завдань поточного контролю в кожному зі змістовних модулів –  $(10+3)*3$ . Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100-бальною шкалою.

Розуміння оцінювання розглядається зі студентами після першого практичного завдання для самостійного розв'язання та на основі цього підготовки коротких (3-5 хвилин) доповідей під час проведення наступних практичних.

Перша, друга та третя модульна робота представлена у вигляді двох рівнів: тестового та короткого розгорнутого, студент отримує 10 балів.

Починаючи з 2го практичного заняття студенти роблять домашні завдання із використанням будь-яких методів та форм представлення інформації: домашні завдання оцінюються з точки зору правильності отриманих результатів, структури роботи, пояснення отриманих результатів у 9 балів протягом семестру. Мінімум за дане завдання – 0 балів – у разі невиконання студентом завдання протягом семестру

За результатами оцінювання першого змістовного модуля, розглядається форма 2 та 3тої модульних робіт, зокрема тестові чи інтерактивні.

Протягом семестру студенти мають виконати, підготувати звіт та усно захистити 9 домашніх самостійних завдань.

Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 36 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

Таким чином, підсумкова оцінка з дисципліни (мінімум 60, максимум 100 балів) складається із суми кількості балів за семестр (мінімум 36, максимум 60 балів) та екзаменаційної роботи (мінімум 24, максимум 40 балів).

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

<b>Зараховано / Passed</b>	60-100
<b>Не зараховано / Fail</b>	0-59

### 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	самостійна робота
<b>1 - Моделювання</b>				
1	<b>Вступ.</b> <b>Тема 1.</b> Вступ. Бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації для вирішення завдань сучасної комп'ютерної біології.	1		4
2	<b>Тема 2.</b> Програмне забезпечення для молекулярного моделювання, основні терміни, тьюторіали, найплайни та допоміжна література.	1		4
3	<b>Тема 3.</b> Функціональні особливості білків, нуклеїнових кислота та їх ефекторів. Основні алгоритми комп'ютерного молекулярного моделювання, їх межі застосовності, точність.	1	2	4
4	<b>Тема 4.</b> Моделювання просторової структури лігандів. Межі застосовності та точність алгоритмів.	1	2	4
5	<b>Тема 5.</b> Моделювання просторової структури білків. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	1	2	4
	<b>Модульна контрольна робота</b>			
<b>2 - Механіка/Докінг</b>				
6	<b>Тема 6.</b> Принципи динамічності та перебудови молекул.	1		4
7	<b>Тема 7.</b> Типи молекулярного докінгу.	1		4
8	<b>Тема 8.</b> Механізми взаємодії білків з нуклеїновими кислотами. Межі застосовності та точність алгоритмів.	1	2	4

9	Тема 9. Механізми білок-білкових взаємодій.	1	2	4
10	Тема 10. Механізми взаємодії низькомолекулярних речовин з білками. Межі застосовності та точність алгоритмів.	1	2	4
	<b>Модульна контрольна робота</b>			
<b>2 - Динаміка</b>				
11	Тема 11. Типи графічної симуляції фізики речовин.	1		4
12	Тема 12. Типи ресурсоемних обчислень. Програмні рішення для покращення та пришвидшення ресурсоемних обчислень.	1		4
13	Тема 13. Класична молекулярна динаміка.	2	2	4
14	Тема 14. Методи аналізу розрахунку не рівноважної молекулярної динаміки.	2	2	4
15	Тема 15. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів.	2	2	4
	<b>Модульна контрольна робота</b>			
<b>2 – Взаємозв'язок, техніка та адміністрування</b>				
16	Мінуси та плюси практичних методів. Порівняння практичних методів з методами <i>in silico</i> .	2		4
	Підсумкова контрольна робота. Захист семестрової роботи.		2	16
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>20</b>	<b>20</b>	<b>80</b>

**Загальний обсяг 120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **20 год.**

Практичні заняття - **20 год.**

Самостійна робота - **80 год.**

## 9. Рекомендовані джерела:

### Основна:

1. Lesk A.M. Introduction to Bioinformatics. Oxford, United Kingdom, Oxford University Press (2020), 432 pages.
2. Leach A.R. Molecular Modelling: Principles and Applications 2nd Edition.
3. Introduction to Structural Bioinformatics (Lecture Notes and Course Information) -[http://128.178.54.93/Course/bioinfo/www\\_files/bioinfo.html](http://128.178.54.93/Course/bioinfo/www_files/bioinfo.html)
4. Bourne P.E. (Editor), Gu J.(Editor). Structural Bioinformatics 2nd Edition. Wiley-Blackwell; 2nd edition (March 16, 2009), 1096 pages.

### Додаткова:

1. Michael P. Allen, Dominic J. Tildesley (Author). Computer Simulation of Liquids 2nd Edition. Oxford University Press; 2nd edition (August 22, 2017), 640 pages.
2. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press (2021), 664 pages.

## 10. Додаткові ресурси:

<https://www.knime.com/software>

<https://bio.tools/>

<https://www.expasy.org/>

<https://pdb101.rcsb.org/learn/paper-models>

<http://www.yasara.org/biotools.htm>