

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Біоінформатика

(повна назва дисципліни)

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 « Прикладна фізика та наноматеріали»
освітній рівень	Магістр
освітня програма	Високі технології (прикладна фізика та наноматеріали)
вид дисципліни	<u>за вибором студента</u>

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	4.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

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 – 2021

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 молекулярної біотехнології та біоінформатики



Олексій НИПОРКО

(прізвище та ініціали)

Протокол №7 від «05» лютого 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «05» березня 2021 року №3

Голова науково-методичної комісії



Наталя РУСІНЧУК

(прізвище та ініціали)

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. Володіти елементарними навичками проводити аналіз первинної та просторової структури мікро- та макромолекул для реалізації обчислень.

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 дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

інтегральної:

Здатність самостійно ставити та розв'язувати на інноваційному рівні наукові та науково-технічні задачі проблеми у галузі прикладної фізики, нанофізики, наноматеріалознавства та високих технологій, пов'язані із виготовленням, аналізом властивостей, використанням наноматеріалів, проектування та виготовлення наносенсорних систем, що передбачає застосування теоретичних знань та навичок з фізики, математики, інженерії, програмування, вибраних розділів хімії та біології.

загальних:

ЗК01. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК02 Здатність спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово

ЗК06. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК08. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК10. Навики здійснення безпечної діяльності.

ЗК13. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми, що потребує оновлення та інтеграції знань, часто в умовах неповної/недостатньої інформації та суперечливих вимог.

ЗК15 Здатність до прийняття рішень у складних і непередбачуваних умовах, що потребує застосування нових підходів та прогнозування.

ЗК 16. Здатність генерувати нові ідеї.

ЗК18. Здатність провадження дослідницької та інноваційної діяльності на відповідному рівні.

спеціальних (фахових, предметних):

ФК01. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК03. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти.

ФК04. Здатність встановлювати взаємозв'язок внутрішньої структури елементів та

компонентів сучасного обладнання з їх електричними і електрофізичними характеристиками та параметрами.

ФК06. Здатність встановлювати області застосування виробів електронної техніки.

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
Програмні результати навчання							
ПР01. Володіти поглибленим рівнем знань у прикладній фізиці, наноматеріалознавстві, високих технологіях та споріднених областях, включаючи методики проведення експериментів і технології отримання наноматеріалів, рівень цих знань повинен бути достатнім для проведення наукових досліджень на рівні останніх світових досягнень і направленим на їх розширення та поглиблення.	+	+	+	+			
ПР04 Виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів	+	+	+	+			
ПР05. Обговорювати та знаходити прогресивні та інноваційні рішення проблем і завдань при виконанні науково-технічних та виробничих проектів.			+		+	+	+
ПР07. Ефективно працювати як індивідуально, так і в складі команди, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.						+	
ПР09. Визначати напрямки перспективних досліджень з урахуванням світових тенденцій розвитку науки, техніки й технологій				+		+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульні контрольні роботи (3 роботи): 17 балів/12 балів.

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

3. Підсумкова контрольна робота: 24 бали/40 балів

Усього: 100 балів/60 балів.

- підсумкове оцінювання: відсутнє.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
Всього	60	100

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 – $(17+3)*3$. 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 17 балів.

Починаючи з 2го практичного заняття студенти роблять домашні завдання базуючись на об'єктах власних наукових робіт 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 3-ї модульних робіт, зокрема тестові чи інтерактивні.

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

Вивчення курсу завершується підсумковою контрольною роботою з усною співбесідою.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

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

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	самостійна робота
1 - Моделювання				
1	Вступ. Тема 1. Вступ. Бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації для вирішення завдань сучасної комп'ютерної біології.	1		4
2	Тема 2. Програмне забезпечення для молекулярного моделювання, основні терміни, тьюторіали, пайплайни та допоміжна література.	1		4
3	Тема 3. Функціональні особливості білків, нуклеїнових кислот та їх ефекторів. Основні алгоритми комп'ютерного молекулярного моделювання, їх межі застосовності, точність.	2		4
4	Тема 4. Моделювання просторової структури лігандів. Межі застосовності та точність алгоритмів.	1	2	4
5	Тема 5. Моделювання просторової структури білків. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	1	2	4
	Модульна контрольна робота			
2 - Механіка/Докінг				
6	Тема 6. Принципи динамічності та перебудови молекул.	1		4
7	Тема 7. Типи молекулярного докінгу.	1		4
8	Тема 8. Механізми взаємодії білків з нуклеїновими кислотами. Межі застосовності та точність алгоритмів.	2	2	4
9	Тема 9. Механізми білок-білкових взаємодій.	2	2	4
10	Тема 10. Механізми взаємодії низькомолекулярних речовин з білками. Межі застосовності та точність алгоритмів.	2	2	4
	Модульна контрольна робота			
2 - Динаміка				
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		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
	Модульна контрольна робота			
2 – Взаємозв'язок, техніка та адміністрування				

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
	ВСЬОГО	24	16	80

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – **24 год.**

Лабораторні заняття - **16 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
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>