

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора

з науково-педагогічної роботи

_____ Галина ГРАБЧУК

« 22 » 03 2021 року

Григорук 29

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Біоінформатика

(повна назва дисципліни)

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань **10 Природничі науки**

(шифр і назва)

спеціальність **102 Хімія**

(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень **магістр**

(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)

освітня програма **Високі технології**

(Хімія та наноматеріали)

(назва освітньої програми)

вид дисципліни **вибіркова**

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: Нипорко Олексій Юрійович, д.б.н., завідувач кафедри молекулярної біології та біоінформатики

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

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

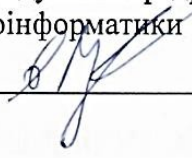
КИЇВ – 2021

Розробники:

Нипорко Олексій Юрійович, д.б.н., завідувач кафедри молекулярної біології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

 Олексій НИПОРКО


Протокол № 4 від «05» лютого 2021р.

Схвалено науково - методичною комісією

«Інституту високих технологій»

Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «05» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії  (Русінчук Н.М.)

«05» 03 2021 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – поглиблене ознайомлення студентів з сучасними методами аналізу первинної та просторої структури білків для ідентифікації приналежності до певної родини, визначення функцій невідомих та уточнення/розширення функцій раніше ідентифікованих білків, аналізу мереж міжмолекулярних взаємодій та метаболічної реконструкції, та оволодіння підходами та навичками використання сучасних програмних середовищ і інтернет-ресурсів в галузі біоінформатики білків .

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

1. Опанувати навчальні дисципліни «Теоретична і прикладна біоінформатика», «Структурна та функціональна геноміка» .
2. Володіти елементарними навичками комп'ютерного пошуку інформації та користування інтернет-ресурсами.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Предметом навчальної дисципліни є методи аналізу первинної та просторої структури білків, які використовуються для того, щоб визначати особливості та функціональну роль білків в організмі.

В курсі робиться огляд основних сучасних методів молекулярної біології для лабораторного та камерального опрацювання біологічного матеріалу з метою встановлення родинних відносин між організмами, побудови філогенетичних дерев та молекулярної ідентифікації рослин, тварин і грибів: екстракція ДНК, ампліфікація, асемблінг нуклеотидних послідовностей, множинне вирівнювання послідовностей, побудова філогенетичних дерев та вторинної структури РНК. Розглядаються основні доступні програмні засоби та інтернет-ресурси і відпрацьовуються навички роботи з ними.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел

ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

ФК11. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати належні напрями та відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.

ФК12. Розуміння етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність)

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 особливості біоінформатики білків 1D та 3D, канонічні і неканонічні елементи вторинної структури білків.	Лекції	Іспит: 1 запитання	8%
1.2	Знати механізми агрегації білків та формування амілоїдних фібрил та методи їх визначення.	Лекції, практичні роботи	Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента	16%
1.3	Знати та розуміти білкові взємодії.	Лекції, практичні роботи	Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента	24%
2.1	Уміти використовувати методи пошуку віддалених гомологів, методи передбачення просторової структури трансмембранних білків, методи аналізу структури та функцій природньо-невпорядкованих білків.	Практичні роботи, самостійна робота студента	Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента	16%
2.2	Уміти визначати функції білків на основі даних про їх структуру.	Практичні роботи, самостійна робота студента	Іспит: 1 запитання, семестрова робота студента	16%
3.1	Вміти донести інформацію про постановку задачі та розв'язання її методами біоінформатики білків до аудиторії з використанням педагогічних технік.	Самостійна робота студента	Доповідь під час інтерактивних лекцій	6%
4.1	Вміти передбачати функції білків за результатами даних структурної геноміки.	Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента	Доповідь під час інтерактивних лекцій, семестрова робота студента	14%

Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни (код) Програмні результати навчання (назва)	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	3.1	4.1
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	+	+			
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+	+			
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.					+	+	+	+
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+	+	+	+	+
P16. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.					+	+	+	+
PP19. Оцінювати актуальність досліджуваних наукових проблем, придатність відомих наукових методів для їх дослідження на	+	+	+	+				+

основі аналізу наявних даних та публікацій у провідних виданнях.								
P17. Працювати з хімічними та біологічними базами даних.	+	+			+	+		+
P20. Знати основні принципи виведення на ринок нового фармацевтичного препарату.	+	+	+	+				

6. Схема формування оцінки.

6.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Самостійна семестрова робота: РН 2.1. - 48 балів/32 бали.

2. Доповідь під час лекції: РН 1.4,3.1 - 12 балів/6 балів.

- підсумкове оцінювання: іспит – 40 балів.

Усього: 100 балів/60 балів.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Іспит	24	40
Всього	60	100

6.2 Організація оцінювання:

На початку семестру студенти отримують теми для підготовки коротких (3-5 хвилин) доповідей під час проведення лекцій. Починаючи з 2 лекційного заняття студенти роблять свої доповіді із використанням будь-яких методів та форм представлення інформації: зміст доповіді оцінюється з точки зору її новизни, актуальності, науковості (використання наукових джерел інформації) та повноти викладення у 7 балів, а якість донесення інформації до аудиторії – у 5 балів. Мінімум за дане завдання – 6 балів – може бути отримано за умови підготовки доповіді у текстовому форматі з презентацією без усної доповіді під час лекції.

Після першого практичного заняття студенти отримують індивідуальні завдання до семестрової роботи. Кожне завдання складається з 6 частин. Кожна окрема частина присвячена темі окремого практичного заняття з першого по шосте. Кожна частина оцінюється в 8 балів: 5 бали за правильність розв'язку та 3 бали за обґрунтування методів розв'язку, викладене у звіті. У випадку помилок у розв'язку завдання студенту дозволяється їх виправити після перевірки. Мінімальну кількість балів студент може отримати у випадку правильного розв'язання усіх завдань без представлення їх письмового обґрунтування.

У кінці семестру після завершення вивчення тем проводиться іспит. Іспит спрямований на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр та вміння застосовувати отримані знання до розв'язання задач. Результати іспиту студенти дізнаються у той самий день. Іспит вважається складеним, якщо студент надав хоча короткі відповіді на 60 % запитань. У цьому випадку він отримує мінімально можливу оцінку за іспит – 24 бали.

Вважається курс пройденим лише за умови успішного виконання кожного з трьох оцінювань хоча б на мінімально можливий бал: підготовку доповіді, розв'язання семестрової роботи та складання іспиту.

6.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

7. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних

занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійна робота
Частина 1 Теоретичне навчання				
1	Тема 1. Вступні зауваження. Біоінформатика білків 1D та 3D. Аналіз коеволюції амінокислотних послідовностей. Статистичне передбачення функціональних залишків.	1		5
2	Тема 2. Передбачення особливостей 1D структури. Доменна архітектура. Сигнальні послідовності. Канонічні і неканонічні елементи вторинної структури.	1		5
3	Тема 3. Передбачення просторової структури білків методами <i>ab initio</i> . Фізичні та статистичні функції оцінки енергії. Методи конформаційного пошуку.	2		6
4	Тема 3. Розпізнання типу згортки (фолдингу) білка. Методи пошуку віддалених гомологів. Профілі. Приховані моделі Маркова.	2	2	6
5	Тема 4. Сучасні методи передбачення просторової структури трансмембранних білків.	2	2	6
6	Тема 5. Методичні підходи до аналізу структури та функцій природньо-невпорядкованих білків.	2	2	6
7	Тема 6. Передбачення агрегації білків та формування амілоїдних фібрил.	1		6
9	Тема 7. Білки як основа біомолекулярних комплексів. Методи аналізу механізмів комплексоутворення та передбачення структури комплексів білків з природніми та штучними партнерами.	1		6
10	Тема 8. Функціональна різноманітність в межах білкових фолдів/родин/надродин.	2	2	6
11	Тема 9. Передбачення функцій білка на основі властивостей молекулярної поверхні.	2	2	6
12	Тема 11. Динаміка білків: від структури до функції. Аналіз головних компонент. Аналіз нормальних мод. Моделі еластичної мережі.	2	2	6
8	Тема 12. Функціональне анотування білкових генів. Мережі білкових взаємодій. Метаболічні мережі.	2	2	6
13	Тема 13. Біоінформатика пост-трансляційних модифікацій.	2	2	6
14	Тема 14. Передбачення функцій білків за результатами даних структурної геноміки.	2		4
	ВСЬОГО	24	16	80

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – **24 год.**

Практичні заняття - **16 год.**

Самостійна робота - **80 год.**

8. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Rigden, D. J., ed. From Protein Structure to Function with Bioinformatics, Springer, 2017
2. Wu C. H., Arighi C. N., Ross K. E., eds. Protein Bioinformatics: From Protein Modifications and Networks to Proteomics, Humana Press, 2017.
3. Pazos F., Chagoyen M. Practical Protein Bioinformatics, 2015.
4. Abriata L A, Peraro M D. State-of-the-art web services for de novo protein structure prediction/ Briefings in Bioinformatics, Volume 22, Issue 3, May 2021, bbaa139, <https://doi.org/10.1093/bib/bbaa139>

Додаткова:

1. Mrozek, D. Scalable big data analytics for protein bioinformatics: efficient computational solutions for protein structures, Springer, 2018
2. Pan Y., Wang J., Li M. Algorithmic and Artificial Intelligence Methods for Protein Bioinformatics. Wiley-IEEE Computer Society Press, 2013

9. Додаткові ресурси:

1. <http://tolweb.org/tree/>
2. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
3. <http://uniprot.org>
4. <https://robetta.bakerlab.org/login.php>