

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Біоінформатика**

*(повна назва дисципліни)*

галузь знань 10 Природничі науки  
спеціальність **102 Хімія**  
освітній рівень **магістр**  
освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**

**вид дисципліни** обов'язкова

|  |            |
|--|------------|
| <b>Форма навчання</b>                          | денна      |
| <b>Навчальний рік</b>                          | 2021/2022  |
| <b>Семестр</b>                                 | 1          |
| <b>Кількість кредитів ECTS</b>                 | 5.0        |
| <b>Мова викладання, навчання та оцінювання</b> | українська |
| <b>Форма заключного контролю</b>               | екзамен    |

**Викладач:** к.ф.-м.н., асист. Войтешенко І.С.

к.б.н., доц. Самофалова Д. О.

к.б.н., доц. Нипорко О. Ю.

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

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


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 розв'язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.

загальних:

ЗК03. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК06. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК08. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК09. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК13. Здатність до активного збереження довкілля.

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

спеціальних (фахових, предметних):

ФК04. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК09. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

### 5. Результати навчання за дисципліною:

| Результат навчання<br>(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 ресурсоемних 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>   |     |     |     |     |     |     |     |
| P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.  | +   | +   | +   | +   |     |     |     |
| P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними. | +   | +   | +   | +   |     |     |     |
| P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.                                     |     |     | +   |     | +   | +   | +   |
| P12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.   |     |     |     |     |     | +   | +   |

## 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        |
| <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 –  $(17+3)*3$ . 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 3тої 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          | лабора<br>торні | практичн<br>і | самості<br>йна<br>робота |
| <b>1 - Моделювання</b> |   |                 |                 |               |                          |
| 1                      | Вступ.<br>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  | 1               |                 |               | 4                        |

|  |  |           |           |           |            |
|--|--|-----------|-----------|-----------|------------|
|  | <i>модельовання, основні терміни, тьюторіали, пайплайни та допоміжна література.</i>   |           |           |           |            |
| 3  | <b>Тема 3.</b> Функціональні особливості білків, нуклеїнових кислот та їх ефекторів. Основні алгоритми комп'ютерного молекулярного моделювання, їх межі застосовності, точність. | 2         |           | 2         | 4          |
| 4  | <b>Тема 4.</b> Моделювання просторової структури лігандів. Межі застосовності та точність алгоритмів.  | 2         | 2         |           | 4          |
| 5  | <b>Тема 5.</b> Моделювання просторової структури білків. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.   | 2         | 2         |           | 4          |
|  | <b>Модульна контрольна робота</b>  |           |           |           |            |
| <b>2 - Механіка/Докінг</b>                           |  |           |           |           |            |
| 6  | <b>Тема 6.</b> Принципи динамічності та перебудови молекул.  | 1         |           | 2         | 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.   | 2         | 2         |           | 4          |
| 9  | <b>Тема 9.</b> Механізми білок-білкових взаємодій.   | 2         |           | 2         | 4          |
| 10   | <b>Тема 10.</b> Механізми взаємодії низькомолекулярних речовин з білками. Межі застосовності та точність алгоритмів.   | 2         | 2         |           | 4          |
|  | <b>Модульна контрольна робота</b>  |           |           |           |            |
| <b>2 - Динаміка</b>                                  |  |           |           |           |            |
| 11   | <b>Тема 11.</b> Типи графічної симуляції фізики речовин.   | 1         |           | 2         | 4          |
| 12   | <b>Тема 12.</b> Типи ресурсоемних обчислень. Програмні рішення для покращення та пришвидшення ресурсоемних обчислень.  | 1         |           |           | 4          |
| 13   | <b>Тема 13.</b> Класична молекулярна динаміка.   | 2         |           | 2         | 4          |
| 14   | <b>Тема 14.</b> Методи аналізу розрахунку не рівноважної молекулярної динаміки.  | 2         | 2         |           | 4          |
| 15   | <b>Тема 15.</b> 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         |           | 2         | 4          |
|  | Підсумкова контрольна робота. Захист семестрової роботи.   |           |           | 2         | 16         |
|  | <b>ВСЬОГО</b>  | <b>26</b> | <b>12</b> | <b>12</b> | <b>100</b> |

**Загальний обсяг 150 год.**, в тому числі:

Лекцій – **26 год.**

Лабораторні заняття - **12 год.**

Практичні заняття - **12 год.**

Самостійна робота - **100 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>