

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

Загальна та прикладна біоінформатика

(повна назва дисципліни)

для студентів

галузь знань 09 Біологія  
(шифр і назва)  
спеціальність 091 Біологія  
(шифр і назва спеціальності)  
освітній рівень магістр  
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)  
освітня програма Біоінформатика та структурна біологія  
(назва освітньої програми)  
вид дисципліни обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	1
Кількість кредитів ECTS	6.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: Самофалова Дарія Олексіївна, к.б.н., доцент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики  
Нипорко Олексій Юрійович, к.б.н., доц., зав. кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

Пролонговано: на 20 21 / 20 22 н.р. [підпис] (підпис, ПІБ, дата) « 25 » 03 2021 р. 1 червня 2021

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

КИЇВ – 2020


ННД05

Розробники:

Самофалова Дарія Олексіївна, к.б.н., доцент 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

  
\_\_\_\_\_ (Нипорко О.Ю.)  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Протокол № 12 від « 12 » 06 2020 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від « 24 » червня 2020 року № 3

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (Русінчук Н.Н.)  
(підпис) (прізвище та ініціали)

ННД05

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з відомими методами та програмними засобами загальної і прикладної біоінформатики для розв'язання біологічних 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 користуватися біоінформатичними базами даних та он-лайн сервісами, розрізняти різні типи та формати запису молекулярно-біологічної інформації.
3. Володіти елементарними навичками проводити аналіз первинної та просторової структури мікро- та макромолекул для реалізації обчислень.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Предмет навчальної дисципліни охоплює комплексне вивчення загальної 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 для розв'язання рівнянь, обробки даних, створення імітаційних моделей біологічних процесів або їх верифікації.

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 біології.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

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

ЗК02. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК03. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

СК01. Здатність користуватися новітніми досягненнями біології, необхідними для професійної, дослідницької та/або інноваційної діяльності. Здатність застосовувати знання у професійній діяльності з урахуванням новітніх досягнень, у т.ч. для дослідницької роботи.

СК02. Здатність формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів на прикладі різних рівнів організації живого із використанням математичних методів й інформаційних технологій.

СК03. Здатність користуватися сучасними інформаційними технологіями та аналізувати інформацію в галузі біології і на межі предметних галузей.

СК06. Здатність прогнозувати напрямки розвитку сучасної біології на основі загального аналізу розвитку науки і технологій.

**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,	Лекції	Модульна контрольна робота	15%

	<i>інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації.</i>			
1.2	<i>Знати основні методи та принципи динамічності та перебудови молекул, що використовуються для вивчення міжмолекулярних взаємодій біополімерів та їх систем, розуміти межі їх застосовності, точність.</i>	<i>Лекції</i>	<i>Модульна контрольна робота</i>	<i>15%</i>
1.3	<i>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.</i>	<i>Лекції</i>	<i>Модульна контрольна робота</i>	<i>15%</i>
1.4	<i>Знати перелік задач сучасної біології, до розв'язання яких застосовуються специфічні біоінформатичні методи чи алгоритми</i>	<i>Самостійна робота студента</i>	<i>Питання на модульній контрольній роботі</i>	<i>6%</i>
2.1	<i>Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розв'язання задач структурної біології та біоінформатики та створювати комп'ютерні моделі реальних об'єктів та процесів.</i>	<i>Практичні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>Домашні самостійні завдання</i>	<i>9%</i>
3.1	<i>Вміти донести інформацію про постановку задач сучасної структурної біології та біоінформатичні методи їх розв'язання до аудиторії.</i>	<i>Самостійна робота студента</i>	<i>Усна відповідь на екзамені</i>	<i>10%</i>
4.1	<i>Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору методу.</i>	<i>Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента</i>	<i>Ввідповідь на екзамені: обґрунтування методів Розв'язання задачі на екзамені</i>	<i>15%</i>  <i>15%</i>

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

<b>Результати навчання дисципліни</b>	<b>1.1</b>	<b>1.2</b>	<b>1.3</b>	<b>1.4</b>	<b>2.1</b>	<b>3.1</b>	<b>4.1</b>
<b>Програмні результати навчання</b>							
ПР2. Використовувати бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації.				+	+	+	+
ПР4. Розв'язувати складні задачі в галузі біології, генерувати та оцінювати ідеї.	+	+	+		+		+
ПР6. Аналізувати біологічні явища та процеси на молекулярному, клітинному, організменному, популяційно-видовому та біосферному рівнях з точки зору фундаментальних загальнонаукових знань, а також за використання спеціальних сучасних методів досліджень.				+	+		+
ПР10. Представляти результати наукової роботи письмово (у вигляді звіту, наукових публікацій тощо) та усно (у формі доповідей та захисту звіту) з використанням сучасних технологій, аргументувати свою позицію в науковій дискусії.	+	+	+	+	+		+
ПР16. Моделювати об'єкти і процеси у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.	+	+	+				
ПР17. Розробляти програмне забезпечення для обробки біомолекулярних даних.					+		

## 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.

Усього: 60 балів/36 балів.

#### - підсумкове оцінювання: екзамен: 40 балів/24 бали.

Структура екзаменаційного білета: 3 запитання з розгорнутою відповіддю (РН1.1-1.3) по 8 балів + 1 практичне завдання з захистом (16 балів).

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Екзамен	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 –  $(17+3)*3$ . 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.

Студент допускається до екзамену лише за умови виконання усіх модульних контрольних робіт, підготовки по ним звіту та усного їх захисту хоча б на мінімально можливий бал.

Вивчення курсу завершується письмовим екзаменом з усною співбесідою. Екзамен спрямований на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр та вміння застосовувати отримані знання до розв'язання задач. Екзамен вважається складеним, якщо студент отримав мінімально можливу оцінку – 24 бали.

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

За шкалою університету (100-бальною системою)	Оцінка за національною шкалою	
90-100	відмінно	5
75-89	добре	4
60-74	задовільно	3
1-59	незадовільно	2

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

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	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.	4		6
2	<b>Тема 2.</b> Програмне забезпечення для молекулярного моделювання, основні терміни, тьюторіали, пайплайни та допоміжна література.	4		8
3	<b>Тема 3.</b> Функціональні особливості білків, нуклеїнових кислот та їх ефекторів. Основні алгоритми комп'ютерного молекулярного моделювання, їх межі застосовності, точність.	2		8
4	<b>Тема 4.</b> Моделювання просторової структури лігандів. Межі застосовності та точність алгоритмів.	2	2	8
5	<b>Тема 5.</b> Моделювання просторової структури білків. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	2	2	8
	<b>Модульна контрольна робота</b>			2
<b>2 - Механіка/Докінг</b>				
6	<b>Тема 6.</b> Принципи динамічності та перебудови молекул.	4		6
7	<b>Тема 7.</b> Типи молекулярного докінгу.	2		8
8	<b>Тема 8.</b> Механізми взаємодії білків з нуклеїновими кислотами. Межі застосовності та точність алгоритмів.	2	2	8
9	<b>Тема 9.</b> Механізми білок-білкових взаємодій.	2	2	8
10	<b>Тема 10.</b> Механізми взаємодії низькомолекулярних речовин з білками. Межі застосовності та точність алгоритмів.	2	2	8
	<b>Модульна контрольна робота</b>			2
<b>2 - Динаміка</b>				
11	<b>Тема 11.</b> Типи графічної симуляції фізики речовин.	4		6
12	<b>Тема 12.</b> Типи ресурсоемних обчислень. Програмні рішення для покращення та пришвидшення ресурсоемних обчислень.	2		8
13	<b>Тема 13.</b> Класична молекулярна динаміка.	2		8
14	<b>Тема 14.</b> Методи аналізу розрахунку не рівноважної молекулярної динаміки.	2	2	8
15	<b>Тема 15.</b> Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів.	2	2	8
	<b>Модульна контрольна робота</b>			2
<b>2 – Взаємозв'язок, техніка та адміністрування</b>				
16	Мінуси та плюси практичних методів. Порівняння практичних методів з методами <i>in silico</i> .	4		4
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>42</b>	<b>14</b>	<b>124</b>

Загальний обсяг 180 год., в тому числі:

Лекцій – 42 год.

Практичні заняття - 14 год.

Самостійна робота - 124 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>