



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра физико-химической биологии, биоинженерии и биоинформатики



Рабочая программа дисциплины

Наименование дисциплины:

Б1.В.10 «СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ БИОИНФОРМАТИКА»

: 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»

Направленность (профиль): «Биоинженерия и биоинформатика»

Квалификация выпускника: биоинженер и биоинформатик

Форма обучения: очная с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий

Согласовано с УМК биолого-почвенного
факультета
Протокол №7 от 20.05.2024
Председатель А. Н. Матвеев

Рекомендовано кафедрой физико-химической
биологии, биоинженерии и биоинформатики
Протокол №15 от 17.04.2024
Зав. кафедрой В.П. Саловарова

Иркутск 2024 г.

Содержание

	стр.
I. Цель и задачи дисциплины	3
II. Место дисциплины в структуре ОПОП	3
III. Требования к результатам освоения дисциплины	3
IV. Содержание и структура дисциплины	6
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	6
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	12
4.3 Содержание учебного материала	16
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	19
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	22
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	24
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)	27
V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	27
а) перечень литературы	28
б) периодические издания	28
в) список авторских методических разработок	28
г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы.....	
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины	29
6.1. Учебно-лабораторное оборудование	29
6.2. Программное обеспечение	30
6.3. Технические и электронные средства обучения	30
VII. Образовательные технологии	30
VIII. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	31

I. Цель и задачи дисциплины (модуля):

Цель: получение знаний о современном состоянии структурной биоинформатики, ознакомление с новыми методами анализа биологических макромолекулярных трехмерных структур и взаимосвязи структуры и функции на экспериментально решенных и на вычислительных моделях.

Задачи курса:

1. Познакомить студентов с современными методами анализа биологических макромолекулярных трехмерных структур;
2. Ознакомить с форматами хранения информации о структуре макромолекул, базами данных структур, поиском в базах данных и поиском по последовательности и по структуре.
3. Рассмотреть молекулярно-механические модели, границы применимости, методы предсказания и дизайна структуры белков.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Структурно-функциональная биоинформатика» изучается на 4 курсе, в 7 семестре.

2.2. Для освоения данной дисциплины необходимы базовые знания в области биохимии, молекулярной биологии, биофизики и биоинформатики.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной: выполнение и написание ВКР.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по направлению подготовки 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»

ПК-1: Способен творчески использовать и применять фундаментальные представления биологии, смежных дисциплин и современные методологические подходы для определения перспективных направлений научных исследований в сфере получения, изучения и применения различных природных, измененных природных биологических объектов, искусственных, организмов, а также биомacroмолекул, обработку и последующий анализ большого массива информации по биологическим объектам.

ПК-2 Способен планировать, организовывать и контролировать проведение исследований, выбирать методы и средства решения поставленных задач, строить математические модели, осваивать новые информационные и программные ресурсы, получать научные результаты с использованием современных методов, оборудования, вычислительных комплексов в области своей профессиональной деятельности, готовить тексты отчетной документации и публикаций.

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
-------------	------------------------	---------------------

<p><i>ПК-1</i></p> <p>Способен творчески использовать и применять фундаментальные представления биологии, смежных дисциплин и современные методологические подходы для определения перспективных направлений научных исследований в сфере получения, изучения и применения различных природных, измененных природных биологических объектов, искусственных, организмов, а также биомакромолекул, обработку и последующий анализ большого массива информации по биологическим объектам</p>	<p><i>ИДК ПК-1.1</i></p> <p>Знает актуальные проблемы, основные открытия в области изучения живых организмов и биологических систем различных уровней организации и способен использовать теоретические знания и умения в научно-исследовательской деятельности</p>	<p>Знать: основные понятия и современные научные достижения в области структурной биоинформатики;</p> <p>Уметь: ориентироваться в существующих методах обработки и последующего анализа большого массива информации;</p> <p>Владеть: навыками приобретения новых знаний и способностью формировать суждения, используя современные образовательные и информационные технологии</p>
	<p><i>ИДК ПК-1.2</i></p> <p>Умеет использовать фундаментальные знания и современные методологические подходы для перспективных направлений научных исследований, построения информационных моделей и практических разработок в сфере профессиональной деятельности.</p>	<p>Знать: основы методов извлечения и анализа информации из расшифрованных последовательностей ДНК организмов.</p> <p>Уметь: - использовать прикладное программное обеспечение для обработки и извлечения информации из расшифрованных последовательностей ДНК организмов</p> <p>Владеть: - навыками использования полученных знаний при проведении исследовательских и аналитических работ</p>
	<p><i>ИДК ПК-1.3</i></p> <p>Владеет навыками творческого применения методологических подходов для разработки моделей, новых технологий, материалов и биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, методов выработки практических рекомендаций для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>Знать: основные биологические базы данных, содержащие геномную, структурную и другую информацию;</p> <p>Уметь: работать с базами данных, проводить анализ данных с использованием специализированных программ</p> <p>Владеть: способностью использовать базы данных и способностью формировать суждения, исходя из результатов анализа</p>
<p><i>ПК-2</i></p> <p>Способен планировать, организовывать и контролировать проведение исследований, выбирать методы и средства решения поставленных задач, строить математические модели, осваивать новые информационные и программные ресурсы,</p>	<p><i>ИДК ПК-2.1</i></p> <p>Знает классические и современные методы исследований, при реализации научных проектов применяет информационные ресурсы и базы данных, методы формализации и решения задач, анализа научных результатов</p>	<p>Знать: информационные ресурсы и базы данных, методы формализации и решения задач, анализа научных результатов</p> <p>Уметь: проводить анализ данных с использованием специализированных программ и применять его для решения поставленных задач;</p> <p>Владеть: навыками совершенствования своих профессиональных качеств в области анализа биологических</p>

получать научные результаты с использованием современных методов, оборудования, вычислительных комплексов в области своей профессиональной деятельности, готовить тексты отчетной документации и публикаций.		последовательностей и геномных данных
	<i>ИДК ПК-2.2</i> Способен профессионально работать с исследовательским, испытательным оборудованием и установками, вычислительными комплексами, специализированными пакетами программ	Знать: основные специализированные пакеты программ; Уметь: работать с вычислительными комплексами, специализированными пакетами программ Владеть: способностью работать с вычислительными комплексами и использовать специализированные пакеты программ в области анализа биологических последовательностей и геномных данных
	<i>ИДК ПК-2.3</i> Владеет статистическими методами обработки экспериментальных результатов; способен находить и осваивать новые программные ресурсы и применять прикладные компьютерные программные комплексы; представлять результаты исследований и разработок в виде отчетов, докладов, публикаций в научных изданиях.	Знать: статистические методы обработки экспериментальных результатов; Уметь: находить и осваивать новые программные ресурсы и применять прикладные компьютерные программные комплексы; Владеть: способностью представлять результаты исследований и разработок в виде отчетов, докладов, публикаций в научных изданиях

IV.СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов, 17 часов на экзамен.

Из них лекций 18 час, практических занятий 18час., самостоятельная работа-42час, КСР-2

Форма промежуточной аттестации: экзамен

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские /практические /лабораторные занятия	Консультации		
1	Тема 1. Структура белка (вторичная, третичная, четвертичная).	7	22		6	6		10	Устный опрос Контрольные вопросы Доклад

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
					Лекции	Семинарские /практические /лабораторные занятия	Консультации		
2	Тема 2. Биоинформатические подходы к анализу РНК	7	16		4	4		8	Устный опрос Контрольные вопросы Доклад
3	Тема 3. Биоинформатика для протеомных исследований	7	16		4	4		8	Устный опрос Контрольные вопросы Доклад
4	Тема 4. NGS – секвенирование следующего поколения	7	12		2	2		8	Устный опрос Контрольные вопросы Доклад

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские /практические /лабораторные занятия	Консультации		
5	Тема 5. Компьютерное конструирование лекарств	7	12		2	2		8	Устный опрос Контрольные вопросы Доклад

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Трудоемкость (час.)		
7	Тема 1. Структура белка (вторичная, третичная, четвертичная).	Изучение лекционного материала с использованием конспектов, электронных материалов (презентации, книги, статьи) и рекомендуемой литературы, подготовка к практическому занятию, устному и письменному опросу.	1-5	10	Устный доклад, тестирование	лит-ра: 1–6
7	Тема 2. Биоинформатические подходы к анализу РНК	Изучение лекционного материала с использованием конспектов, электронных материалов (презентации, книги, статьи) и рекомендуемой литературы, подготовка к практическому занятию, устному и письменному опросу.	6-9	8	Устный доклад, тестирование	лит-ра: 1–6
7	Тема 3. Биоинформатика для протеомных исследований	Изучение лекционного материала с использованием конспектов, электронных материалов (презентации, книги, статьи) и рекомендуемой литературы, подготовка к практическому занятию, устному и письменному опросу.	10-12	8	Устный доклад, тестирование	лит-ра: 1–6
7	Тема 4. NGS – секвенирование следующего поколения	Изучение лекционного материала с использованием конспектов, электронных материалов (презентации, книги, статьи) и рекомендуемой литературы, подготовка к практическому занятию, устному и письменному опросу.	13-15	8	Устный доклад, тестирование	лит-ра: 1–6
7	Тема 5. Компьютерное конструирование лекарств	Изучение лекционного материала с использованием конспектов, электронных материалов (презентации, книги, статьи) и рекомендуемой литературы, подготовка к практическому занятию, устному и письменному опросу.	16-18	8	лит-ра: 1–6 тестирование КСР	лит-ра: 1–6
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час) –42						

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Трудоемкость (час.)		
Из них объем самостоятельной работы с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий (час) -6						

4.3 Содержание учебного материала

Тема 1. Структура белка (вторичная, третичная, четвертичная). Форматы данных для хранения и визуализации трехмерных структур белков. PDB. Структура PDB файла. Базы данных трехмерных структур (CATH, Dali, SCOP, FSSP, NCBIStructure, NCBI CDD). Инструменты для интерактивной визуализации белковых структур. Выявления сходных 3-мерных структур белков (NCBI VAST). Методы предсказания белковых структур по последовательностям аминокислот. Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования в программе Modeller. Минимизация энергии. Молекулярный докинг. AutoDock. Изучение свойств белковых молекул при помощи программы PyMol.

Тема 2. Биоинформатические подходы к анализу РНК. Экспрессия генов: анализ микроэкранных данных Микрочипы (microarrays) и анализ профилей экспрессии генов. Технология RNASeq. База данных NCBI UniGene, GEO (Gene Expression Omnibus) - базы данных по экспрессии генов. БД EBI: ArrayExpress и ExpressionAtlas. Решение задач поиска достоверно гипер- и гипо- экспрессируемых генов. Принципы нахождения координированных взаимоотношений между генами (генных сетей). Использование языка R для обработки результатов транскриптомных данных. Предварительная обработка и нормализация данных. Диаграммы рассеяния. Статистический анализ микроэкранных данных. Статистический анализ RNASeq данных. Построение тепловой карты изменения генной экспрессии.

Тема 3. Биоинформатика для протеомных исследований. Белок-белковые взаимодействия. Регуляторные и метаболические пути. Построение и анализ биологических сетей. Методы анализа белок-белковых взаимодействий. Базы данных по белок-белковым взаимодействиям (Biogrid, IntAct, CORUM, HIPPIE, HAPPY, ConsensusPathDB). Базы данных регуляторных и метаболических путей (KEGG, HMN, Reactom, NCI pathways, Biocarta, NetPath, Wikipathways). Методы статического и динамического анализа биологических сетей. Навыки работы с программой визуализации и анализа биологических сетей – Cytoscape

Тема 4. NGS – секвенирование следующего поколения. Сборка геномов. Биоинформатика в медицинских исследованиях и клинике. Современные принципы работы с целым геномом. Важнейшие задачи поиска в секвенированном геноме. Нерешенные задачи и перспективы. Сборка геномов. Инструменты для анализа качества результатов секвенирования. Инструменты для сборки и работы с геномом (CLC Workbench). Геномные браузеры UCSC, BLAT, Ensembl, Affymetrix Integrated Genome Browser (IGB). Принципы поиска экзонов и интронов. Поиск ORF (открытых рамок считывания).

Тема 5. Компьютерное конструирование лекарств. Базы данных по низкомолекулярным соединениям и лекарствам (PubChem, ChEMBL, DrugBank, ClinicalTrials.gov). Анализ взаимосвязи «структура-активность». Deskriptory структур химических соединений. Методы машинного обучения. Основные подходы к созданию (Q)SARмоделей.

4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоёмкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции* (индикаторы)
			Всего часов	Из них практическая подготовка		
	2	3	4	5	6	7
1	Тема 1.	Структура белка (вторичная, третичная, четвертичная)	6		Устный доклад, КСР	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
2	Тема 2.	Биоинформатические подходы к анализу РНК	4		Устный доклад, КСР	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
3	Тема 3.	Биоинформатика для протеомных исследований	4		Устный доклад, КСР	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
4	Тема 4.	NGS – секвенирование следующего поколения	2		Устный доклад, КСР	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
5	Тема 5.	Компьютерное конструирование лекарств	2		Устный доклад, КСР	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3

4.3.2 Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС)

Практически к каждому занятию студенты самостоятельно готовят доклад с презентацией по одной из выбранных тем. Темы выдаются преподавателем заранее (на

предыдущем занятии) и согласовываются со всей группой. Во время самостоятельной теоретической подготовки к занятию студент получает индивидуальную консультацию у преподавателя.

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1.	Структура белка (вторичная, третичная, четвертичная).	Изучение теоретического материала, подготовка к докладу и контрольным вопросам	ПК-1, ПК-2	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
2	Биоинформатические подходы к анализу РНК	Изучение теоретического материала, подготовка к докладу и контрольным вопросам	ПК-1, ПК-2	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
3	Биоинформатика для протеомных исследований	Изучение теоретического материала, подготовка к докладу и контрольным вопросам	ПК-1, ПК-2	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
4	NGS – секвенирование следующего поколения	Изучение теоретического материала, подготовка к докладу и контрольным вопросам	ПК-1, ПК-2	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3
5	Компьютерное конструирование лекарств	Изучение теоретического материала, подготовка к докладу и контрольным вопросам	ПК-1, ПК-	ПК-1 ИДК ПК 1.1 ИДК ПК 1.2 ИДК ПК 1.3 ПК-2 ИДК ПК 2.1 ИДК ПК 2.2 ИДК ПК 2.3

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов является составной частью учебного процесса и преследует следующие цели:

- совершенствование навыков самообразовательной работы как основного пути повышения уровня образования;
- углубление и расширение знаний по предмету.

Для организации самостоятельной работы по дисциплине «Структурно-функциональная биоинформатика» используются следующие формы самостоятельной учебной работы:

- изучение материала, изложенного в лекциях;
- изучение и анализ рекомендованной литературы;

- самостоятельный поиск, изучение и анализ литературы по дисциплине, не указанный в списке рекомендованной литературы;
- самостоятельное изучение учебного материала, предусмотренного рабочей программой, но не изложенного в лекциях;

Подготовка к практическому занятию состоит в теоретической подготовке и выполнении практических заданий (решение задач, ответы на вопросы и т.д.):

- подготовка устных докладов;
- подготовка к тестированию (при наличии);
- подготовка к зачету.

Письменные работы. Для изучения тем, не изложенных в лекции, рекомендуется использовать основную и дополнительную литературу, а также источники, найденные при помощи информационно-справочных и поисковых. Для закрепления материала рекомендуется делать краткие конспекты по теме.

Критерии оценки устного доклада

- Новизна текста: а) актуальность темы; б) новизна и самостоятельность в постановке проблемы, формулирование нового аспекта известной проблемы в установлении новых связей (межпредметных, внутрипредметных, интеграционных); в) умение работать с исследованиями, критической литературой, систематизировать и структурировать материал; г) авторская позиция, самостоятельность оценок и суждений; д) стилевое единство текста, единство жанровых черт.
- Степень раскрытия сущности вопроса: а) соответствие содержания теме и плану доклада; б) полнота и глубина знаний по теме; в) обоснованность способов и методов работы с материалом; г) умение обобщать, делать выводы, сопоставлять различные точки зрения по одному вопросу (проблеме).
- Обоснованность выбора источников: а) оценка использованной литературы: привлечены ли наиболее известные работы по теме исследования (в т.ч. журнальные публикации последних лет, последние статистические данные, сводки, справки и т.д.).
- Соблюдение требований к оформлению: а) насколько верно оформлены ссылки на используемую литературу, список литературы; б) оценка грамотности и культуры изложения (в т.ч. орфографической, пунктуационной, стилистической культуры), владение терминологией; в) соответствие презентации содержанию доклада и рекомендациям по ее подготовке (см. п. 4.4).

Оценка *«отлично»*. В докладе полностью раскрыта тема, проанализировано современное состояние вопроса; студент свободно владеет материалом, излагает его логично, последовательно, лаконично, хорошим научным языком. Доклад сопровождается презентацией, которая составлена с соблюдением общих требований оформления, содержит ссылки на приведенные фото, рисунки, схемы и т.д. При обсуждении студент демонстрирует понимание изучаемой проблемы и методологии научного исследования, владение профессиональной терминологией и умение грамотно отвечать на вопросы аудитории.

Оценка *«хорошо»*. Тема раскрыта, приведено достаточное количество материала, но при этом материал в недостаточной степени проанализирован автором. Имеются недочеты в оформлении презентации или презентация не в полной степени соответствует общим требованиям. Ответы студента на вопросы не являются исчерпывающими и аргументированными.

Оценка *«удовлетворительно»*. Тема раскрыта не полностью, материал не проанализирован, студент показывает поверхностные знания. Презентация частично соответствует установленным требованиям. При обсуждении доклада студент дает

неправильные или исчерпывающие ответы.

Оценка *«неудовлетворительно»*. Тема не раскрыта, приведен скудный объем материала; презентация отсутствует или не соответствует требованиям. При обсуждении доклада студент не дает ответы или они не соответствуют вопросам.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовая работа не предусмотрена учебным планом

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) перечень литературы

1. Леск А. Введение в биоинформатику : пер. с англ. / А. М. Леск ; ред.: А. А. Миронов, В. К. Швядаса. - М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - ISBN 978-5-94774-501-6 (8 экз.) +
2. Приставка А.А. Большой практикум по биоинженерии и биоинформатике. В 3 ч. Ч. 1. Белки: учеб. -метод. пособие / А.А. Приставка, В.П. Саловарова. – Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013. – 121 с. - ISBN 978-5-9624-0962-7 (69 экз.) +
3. Белькова, Н. Л. Большой практикум по биоинженерии и биоинформатике: учеб. - метод. пособие: в 3 ч. Ч. 2: Нуклеиновые кислоты. / Н. Л. Белькова - Иркутск: Изд-во ИГУ, 2014 - 155 с. - ISBN 978-5-9624-1184-2 – 39 экз.
4. Стефанов В.Е. Биоинформатика [Электронный ресурс] : учебник для вузов / В. Е. Стефанов, А. А. Тулуб, Г. Р. Мавропуло-Столяренко. - Электрон. текстовые дан. - Москва: Юрайт, 2022. - 252 с. - ЭБС "Юрайт". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-534-00860-9+
5. Биология клетки. Физико-химические, структурно-функциональные и информационные основы [Текст]: учеб. пособие / Г. Ф. Жегунов [и др.]; ред. Г. Ф. Жегунов. - 5-е изд., стер. - М.: Ленанд, 2018. - 542 с. - ISBN 978-5-9710-4976-0 +
6. Фаллер, Джеральд М. Молекулярная биология клетки [Текст]: руководство для врачей / Д. М. Фаллер, Д. Шилдс; пер. с англ. И. Б. Збарского. - М.: Бином, 2016. - 256 с.: ил. ; 26 см. - Пер. изд. : Molecular Basis of Medical Cell Biology / G. M. Fuller. - Stamford, 1998. – ISBN 978-5-9518-0436-5 (6 экз.).+

б) периодические издания

«Математическая биология и Биоинформатика», «Биохимия», «Биофизика», «Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии», «Известия РАН. Серия биологическая», «Молекулярная биология», «Прикладная биохимия и микробиология», «Вопросы вирусологии».

в) список авторских методических разработок:

1. Приставка А.А. Большой практикум по биоинженерии и биоинформатике. В 3 ч. Ч. 1. Белки: учеб. -метод. пособие / А.А. Приставка, В.П. Саловарова. – Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013. – 121 с. - ISBN 978-5-9624-0962-7 (69 экз.)

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. <http://www.protein.bio.msu.ru/biokhimiya/index.htm> - Интернет-версия международного журнала по биохимии и биохимическим аспектам молекулярной биологии, биоорганической химии, микробиологии, иммунологии, физиологии и биомедицинских исследований. Статьи в pdf-формате.
2. <http://www.6years.net/index.php> - портал бесплатной медицинской информации, содержит большое количество книг, учебных пособий биохимической направленности.
3. <http://www.chemexper.com/> - поиск химических соединений в различных базах данных

4. <http://www.dmb.biophys.msu.ru> - Информационная система «Динамические модели в биологии», рассчитанная на широкий круг пользователей, включает в себя гипертекстовые документы и реляционные базы данных и обеспечивает унифицированный доступ к разнообразной информации по данной предметной области.
5. <http://www.elibrary.ru/defaultx.asp> - Научная электронная библиотека, крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 12 млн научных статей и публикаций.
6. <http://www.tusearch.blogspot.com> - Поиск электронных книг, публикаций, законов, ГОСТов на сайтах научных электронных библиотек. В поисковике отобраны лучшие библиотеки, в большинстве которых можно скачать материалы в полном объеме без регистрации. В список включены библиотеки иностранных университетов и научных организаций.
7. <http://www.biengi.ac.ru/analyz.htm> - Биоинформатика в Центре «Биоинженерия» РАН
8. <http://www.bioinformatix.ru/> - Биоинформатика, геномика, протеомика, биософт, имейджинг — портал по биоинформатике, имейджингу и биософту.
9. <http://www.ebi.ac.uk/> - база данных EMBL EBI (European Bioinformatics Institute).
10. <http://www.expasy.ch/> - система анализа белка ExPasy (Expert Protein Analysis System, SwissProt, TrEMBL)
11. <http://www.iscb.org/> - Международное сообщество вычислительной биологии.
12. <http://www.matbio.org/> - электронный журнал «Математическая биология и биоинформатика».
13. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/> - сайт NCBI (National Center Biotech Information)
14. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/blast> - программа выравнивания последовательностей BLAST (Basic Local Alignment Sequence Tool)
15. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/GenbankSearch.html> - база данных GenBank
16. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed> - библиографическая база данных PUBMED
17. <http://www.protein.bio.msu.ru/biokhimiya/index.htm> - Интернет версия международного журнала по биохимии и биохимическим аспектам молекулярной биологии, биоорганической химии, микробиологии, иммунологии, физиологии и биоинформатике. Статьи в pdf-формате.
18. <http://www.rcsb.org/pdb/> - база данных по белкам PDB (Protein 3D Structure database)
19. <http://www.rusbiotech.ru/> - Российские биотехнологии и биоинформатика
20. molbiol.ru - российский сервер с большим количеством справочной информации по биоинформатике на русском языке.
21. ЭБС «Издательство Лань». Адрес доступа <http://e.lanbook.com/>
22. ЭБС «Рукопт». Адрес доступа <http://rucont.ru/>
23. ЭБС «Айбукс». Адрес доступа <http://ibooks.ru>
24. ЭБС «Юрайт». Адрес доступа: <http://biblio-online.ru/>

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Аудитория для проведения занятий практического типа. Аудитория оборудована: *специализированной (учебной) мебелью* на 12 посадочных мест; оборудована *техническими средствами обучения*: Проектор Epson EB-X03, Экран ScreenMedia, Доска аудиторная меловая, магнитная, Лаборатория орган химии - Шкаф вытяжной АФ-221"- 2 шт., Химический шкаф (стеллаж) -1 шт., Лабораторный стол с выкатными тумбами – 5 шт.,

Холодильник «Минск» - 2шт., Аппарат для вертикального электрофореза – 1 шт., Вакуумный испаритель РВО-64 – 1 шт., Вольтметр ВУ-15 – 1 шт., Дезинтегратор УД-20 – 1 шт., Измеритель ионных сопротивлений (импеданса) - 1 шт., Источник питания для электрофореза "Эльф" – 1 шт., Осциллограф универсальный двухлучевой С-55 – 1 шт., Термостат ТС-80 – 1 шт., Центрифуга К-24 – 1 шт., Центрифуга МПВ-310 – 1 шт. Ноутбук Lenovo G580 – 1 шт. служащими для представления учебной информации по дисциплине «Структурно-функциональная биоинформатика» учебно-наглядными пособиями, обеспечивающими тематические иллюстрации по дисциплине в виде презентации.

Компьютерный класс (учебная аудитория) для групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, организации самостоятельной работы. Аудитория оборудована: специализированной (учебной) мебелью на 20 посадочных мест, доской меловой; оборудована техническими средствами обучения: Системный блок PentiumG850, Монитор BenQ G252HDA-1 шт.; Системный блок Athlon 2 X2 250, Монитор BenQ G252HDA – 8 шт.; Системный блок PentiumD 3.0GHz, Монитор Samsung 740N – 3 шт.; Моноблок IRU T2105P – 2 шт.; Системный блок Pentium G3250, Монитор BenQG955 – 1 шт.; Системный блок Pentium G3250, Монитор BenQ GL2250 – 1 шт.; Системный блок Pentium G3250, Монитор Samsung T200 HD – 1 шт.; Системный блок Pentium G3250, Монитор Samsung T190N – 1 шт.; Системный блок tium G3250, Монитор Samsung 740N – 1 шт.; с неограниченным доступом к сети Интернет; Проектор BenQ MX503; экран ScreenVtdiaEcot. Ноутбук Lenovo G580 – 1 шт. С неограниченным доступом к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования. Аудитория оборудована: специализированной мебелью на 8 посадочных мест; Вытяжной шкаф – 1шт., Ламинарный шкаф – 2 шт., Термостат ТС-80 – 2 шт., Лабораторный стол металлический – 3 шт., Лабораторный стол с резиновой поверхностью – 2 шт., Холодильник «Атлант» – 1шт. Микроскоп монокулярный – 8 шт, Микроскоп "Биолам"-1 шт., Стерилизатор паровой ВК-75 ПТ "ТЗМОИ" – 1шт., Пипетка автоматическая Ленпипет 0,5-10 м"-1 шт., Пипетка-дозатор"-1 шт., Микроскоп Levenhuk D870Т тринокуляр"-1 шт., Проектор Оверхед"-1 шт., Проектор View Sonic"-1 шт., Проектор View Sonic"-1 шт., Ноутбук Lenovo"-2 шт., Принтер Brother -1 шт., Принтер Canon -1 шт.

6.2. Программное обеспечение:

- DreamSpark Premium Electronic Software Delivery (3 years) Renewal (Windows 10 Education 32/64-bit (Russian) - Microsoft Imagine, Windows 7 Professional with Service Pack 1 32/64-bit (English) - Microsoft Imagine, Windows Server 2008 Enterprise and Standard without Hyper-V with SP2 32/64-bit (English) - Microsoft Imagine, Access 2016 32/64-bit (Russian) - Microsoft Imagine, Access 2010 32/64-bit (Russian) - Microsoft Imagine). Договор №03-016-14 от 30.10.2014г.
- Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный Russian Edition. 250-499. Форус Контракт №04-114-16 от 14ноября 2016г KES. Счет №РСЦЗ-000147 и АКТ от 23ноября 2016г Лиц.№1В08161103014721370444.
- Microsoft Office Enterprise 2007 Russian Academic OPEN No Level. Номер Лицензии Microsoft 43364238.
- Microsoft Windows XP Professional Russian Upgrade Academic OPEN No Level. Номер Лицензии Microsoft 41059241.
- Office 365 профессиональный плюс для учащихся. Номер заказа: 36dde53d-7cdb-4cad-a87f-29b2a19c463e.

6.3. Технические и электронные средства:

- Презентации по всем темам курса;
- Система электронного тестирования на базе образовательного портала Educa;

- Онлайн версии программ для выравнивания последовательностей и филогенетического анализа (BLAST, CLUSTAL, PhyML, T-Coffee, MUSCLE, COBALT)

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Для освоения дисциплины «Структурно-функциональная биоинформатика» применяются следующие образовательные технологии:

- *Информационная лекция* - это сжатое изложение основных научных фактов, что является базой для анализа рассуждений, оценок.
- *Лекция-визуализация*. Учит студентов преобразовывать устную и письменную информацию в визуальную форму, что формирует у них профессиональное мышление за счет систематизации и выделения наиболее значимых, существенных элементов содержания обучения. Задача преподавателя использовать такие формы наглядности, которые не только дополняют словесную информацию, но и сами являются носителями информации (схемы, рисунки, слайды-презентации, и т.п.). Этот вид лекции лучше всего использовать на этапе введения студентов в новый раздел, тему дисциплины.
- *Практические занятия* – это занятие, проводимое под руководством преподавателя в учебной аудитории, направленное на углубление научно-теоретических знаний и овладение определенными методами самостоятельной работы, которое формирует практические умения. Одной из форм практических занятий является коллоквиум.
- *Самостоятельная работа студентов* (см. п.4.4).
- *Дистанционные образовательные технологии*. Под дистанционными образовательными технологиями понимаются образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей. При освоении дисциплины «Основы биоинформатики» используется *компьютерные сетевые технологии* (интернет-технологии) – способ дистанционной передачи информации, основанный на использовании глобальных и локальных компьютерных сетей для обеспечения доступа обучающихся к информационным образовательным ресурсам и для формирования совокупности методических, организационных, технических и программных средств реализации и управления учебным процессом независимо от места нахождения его субъектов. Для организации дистанционного обучения на основе этих технологий используется специализированное программное средство - образовательный портал ИГУ (educa.isu.ru).

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Оценочные материалы для входного контроля

Для входного контроля оценки уровня знаний студентов используется тестирование по основным разделам математики, физики, химии, биохимии и молекулярной биологии.

Демонстрационный вариант теста для входного контроля

1. Какие связи образуют α -спираль во вторичной структуре белка? а) Вандер-Ваальса; б) гидрофобные; в) пептидные; г) водородные
2. Если содержание остатков тимина (от общего числа остатков) ДНК составляет 20%, то содержание гуанина составит: а) 40%; б) 35%; в) 25%; г) 30%

3. Операционная система представляет из себя: а) комплекс программ специального назначения; б) комплекс аппаратных средств; в) совокупность ресурсов компьютера; г) комплекс инструментальных программ.

Оценочные материалы текущего контроля

Оценочные материалы текущего контроля формируются в соответствии с ЛНА университета.

В рамках дисциплины «Структурно-функциональная биоинформатика» используются следующие формы текущего контроля:

формы текущего контроля:

- устный опрос;
- устный доклад, презентация;
- контроль самостоятельной работы.

Фонд оценочных средств включает:

- перечень вопросов и заданий для текущего контроля;
- перечень тем устных докладов;
- перечень вопросов для самостоятельного изучения (СРС);
- перечень вопросов для зачета

Назначение оценочных средств: выявить сформированность компетенции ПК-1, ПК-2 (см. п. III). Студенты, не выполнившие требования текущего контроля или получившие итоговую оценку текущей успеваемости «не удовлетворительно», считается имеющим текущую задолженность. Обучающиеся, имеющие задолженности, должны ликвидировать их не позднее, чем за неделю до начала промежуточной аттестации.

Перечень вопросов и заданий для текущего контроля

Демонстрационные практические задания для текущего контроля

Задание 1.

На конце гена β -гемоглобина человека имеется следующая последовательность:
...ctggccsacaagtatcactaa

- а) Какова аминокислотная последовательность, соответствующая представленной?
- б) Напишите нуклеотидную последовательность, в которой единичная замена нуклеотида приводит к «молчащей» мутации в этом фрагменте.
- в) Напишите нуклеотидную последовательность, в которой единичная замена основания может привести к миссенс-мутации в этом фрагменте.
- г) Напишите нуклеотидную последовательность, в которой единичная замена основания приводит к преждевременной остановке синтеза белка.
- д) Напишите нуклеотидную последовательность, в которой единичная замена нуклеотида приводит к ошибке терминации и продолжению синтеза цепи.

Задание 2

В файле «Альбом белков» найдите «свой» белок и на его условном изображении обозначьте цветом α -спирали (красным) и тяжи β -листа (синим). Если в молекуле имеется несколько доменов, выделите их. Объедините белковые структуры, представленные на рисунках, в категории: α -спираль, β -структура, α/β и $\alpha+\beta$.

Задание 3.

Найдите в БД UniProtKB документ, содержащий информацию о белке, указанно в файле «Индивидуальное распределение белков». Изучите полученный документ и заполните таблицу.

Поле	Метка поля	Содержание
Код доступа		
Идентификатор последовательности в БД		
Название и краткое описание белка		
Дата создания документа		
Дата последнего исправления аннотации		
Название организма		
Полное название таксона		
Длина последовательности		
Молекулярная масса белка		
Название гена, кодирующего этот белок		
Число публикаций, использованных при создании документа		
Выходные данные самой свежей публикации		
Ключевые слова		
Содержание поля комментариев		
Особенности белка		
Перекрестные ссылки		

Задание 4.

Получите и выровняйте последовательность двух белков из лошади, кита и кенгуру: митохондриального цитохрома-b и панкреатической рибонуклеазы.

Сравните степень попарного сходства каждого белка для каждой пары видов. Совместимы ли выводы, полученные в результате анализа последовательностей митохондриального цитохрома-b, с выводами, полученными в результате анализа последовательностей панкреатических рибонуклеаз этих видов?

Задание 5.

В библиографической базе данных PubMed найдите ссылки на статьи, в которых упоминается название вашего белка. Укажите их общее количество. Из списка найденных статей выберите одну и сохраните ее аннотацию в формате txt. Найдите ссылки на все публикации последнего автора этой статьи за последние 3 года. Повторите алгоритм поиска в отечественной библиографической системе e-library.

Задание 6.

С помощью программы BLAST найдите последовательности, гомологичные вашему белку (файл «Индивидуальное распределение белков»). Сформируйте файл с набором последовательностей, для которых будет проводится множественное выравнивание. Проведите множественное выравнивание этих последовательностей с помощью программ семейства CLUSTAL. Повторите выравнивание при разных настройках параметров. Сделайте выводы.

Задание 7.

Гормоны роста большинства млекопитающих имеют очень сходные аминокислотные последовательности. Человеческие гормоны роста отличаются гораздо сильнее. Эволюция гормонов роста ускориалась резко в той линии, которая вела к человеку. Путем выравнивания последовательностей гормонов роста из организмов близкородственных

человеку видов и более отдаленных таксонов определите, где в эволюционном древе человека имело место ускорение эволюции гормонов роста.

Контрольные вопросы для текущей аттестации

1. Опишите полный процесс секвенирования ДНК.
2. Что такое открытая рамка считывания и какова ее роль?
3. Опишите метод определения последовательности клона.
4. Какие методы используют для секвенирования белков?
5. В чем состоит анализ экспрессии белков?
6. Какие подходы к обнаружению генов вам известны?
7. Приведите пример организмов, геномы которых были успешно расшифрованы.
8. Какие типы баз данных вы знаете? Какие их функции?
9. Приведите примеры баз данных последовательностей нуклеиновых кислот. Для каких целей они созданы?
10. Каковы функции баз данных белковых последовательностей? Назовите несколько ресурсов.
11. Какая база данных белковых последовательностей является наиболее полной? Какие функциональные разделы в ней выделяют?
12. Что общего и в чем различия между структурными классификациями белков в БД SCOP и CATH?
13. Каковы особенности вторичных баз данных?
14. Каковы цели выравнивания последовательностей?
15. Какие программы применяются для попарного выравнивания последовательностей в базах данных?
16. В чем особенности физического и статистического подходов в биоинформатике?
17. Какие значимые результаты удалось получить в структурной биоинформатике?
18. Как проходит предсказание структуры белков?
19. Что такое молекулярная динамика?
20. Опишите пространственные структуры РНК

Перечень тем устных докладов (ориентировочный)

1. Информатические подходы, используемые в структурной биоинформатике
2. Инструменты структурной биоинформатики
3. NGS – секвенирование следующего поколения
4. Сравнительное моделирование трехмерных структур из аминокислотной последовательности целевого белка и матрицы с известной структурой
5. Молекулярный докинг
6. Виртуальный скрининг
7. Выбор белков-мишеней
8. Проблема прогнозирования структуры белка
9. Белково-лигандные взаимодействия как основа действия лекарственных средств
10. Структурное выравнивание белков
11. Основные физические методы для анализа пространственного строения биологических макромолекул.
12. Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Оценочные материалы для промежуточной аттестации

Форма промежуточной аттестации - *экзамен*. Экзамен проводится в форме тестирования.

Примерный список вопросов для подготовки к тестированию

1. Роль физико-химическим и молекулярно-биологических методов исследования биополимеров
2. Основные технические подходы к секвенированию ДНК
3. Методы секвенирования белков – прямые и косвенные
4. Базы данных - функции и классификация. Записи базы данных. Современные тенденции в структурировании БД.
5. Система управления базами данных. Компоненты, функции и типы
6. Базы данных последовательностей нуклеиновых кислот. Специализированные БД.
7. Базы данных белковых последовательностей. Базы данных структур (PDB, SCOP, CATH, VMRB).
8. Вторичные базы данных. Библиографические базы данных.
9. Выравнивание – цели, задачи, основные понятия и определения. Типы выравнивания - глобальное и локальное.
10. Общие принципы выравнивания. Расстояние как критерий меры различия последовательностей.
11. Методы попарного выравнивания последовательностей. Методы динамического программирования.
12. Множественное выравнивание последовательностей. Методы прогрессивного выравнивания. ПО для множественного выравнивания.
13. Сравнительное моделирование. Степень идентичности и сравнительное моделирование
14. Сравнительный анализ структур родственных белков
15. Предсказание функциональных участков белковой молекулы
16. Линейное представление молекул, SMILES. SMARTS: паттерны для SMILES
17. Фрагментарное построение лиганда. QSAR, количественные соотношения структура/ активность
18. Классификация белков на основе их 3D-структуры
19. Белковый докинг
20. Анализ комплексов молекул белка с другими молекулами
21. Анализ структур комплексов двух или нескольких молекул белка
22. Предсказание воздействия молекул химических веществ (например, потенциальных лекарств) на молекулы белков
23. Предсказание структуры белка по структуре белка с похожей последовательностью
24. Предсказание вторичных структур РНК
25. Гомологичный фолдинг белков
26. Принципы нахождения координированных взаимоотношений между генами (генных сетей).
27. Построение и анализ биологических сетей.
28. Методы анализа белок-белковых взаимодействий.

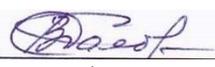
29. Базы данных регуляторных и метаболических путей
30. Методы статического и динамического анализа биологических сетей.
31. Современные принципы работы с целым геномом
32. Инструменты для сборки и работы с геномом
33. Базы данных по низкомолекулярным соединениям и лекарствам
34. Анализ взаимосвязи «структура-активность». Дескрипторы структур химических соединений.
35. Методы машинного обучения. Основные подходы к созданию (Q)SARмоделей.

Разработчик:

 доцент Приставка А.А.
(подпись)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физико-химической биологии, биоинженерии и биоинформатики 17.04.2024 г. протокол № 15.

Зав. кафедрой, д.б.н., профессор В.П. Саловарова 

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.