

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт фундаментальной медицины и биологии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Таюрский Д.А.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Молекулярное моделирование, работа с базами данных Б1.В.ОД.3.1

Направление подготовки: 06.03.01 - Биология

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Акберова Н.И. , Ульянова В.В.

Рецензент(ы):

Ильинская О.Н. , Киямова Р.Г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Киямова Р. Г.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Акберова Н.И. кафедра биохимии, биотехнологии и фармакологии Центр биологии и педагогического образования , nakberova@mail.ru ; старший научный сотрудник, к.н. Ульянова В.В. НИЛ OpenLab Маркеры патогенеза Центр научной деятельности и аспирантуры , Vera.Uljanova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина "Биоинформатика" предназначена для ознакомления

бакалавров с современными представлениями о предмете и основных концепциях биоинформатики, объектах изучения, методах и алгоритмах получения, представления и анализа данных.

Основной целью освоения дисциплины является получение бакалаврами основополагающих сведений о содержании и возможностях биоинформатики, возможностях приложения методов биоинформатики к решению фундаментальных и прикладных проблем молекулярной биологии, молекулярной генетики, клеточной биологии, биомедицины, фармакологии, экологии и задач, возникающих на стыке этих наук с математикой и информатикой.

В результате освоения курса бакалавр должен получить навыки работы с базами первичных последовательностей и структур биологических макромолекул, активно использовать библиографические базы, ориентироваться в биоинформационных программах анализа биологических данных.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.3 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 06.03.01 Биология и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 3 курсе, 5 семестр.

Дисциплина "Биоинформатика" входит в _ Математический и естественнонаучный _ цикл дисциплин , включенных в вариативную часть учебного плана согласно ФГОС ВПО направления- 020400.62 Биология".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-12 (общекультурные компетенции)	способность использовать основные технические средства в профессиональной деятельности: работает на компьютере и в компьютерных сетях, использует универсальные пакеты прикладных компьютерных программ, создает базы данных на основе ресурсов Internet, способен работать с информацией в глобальных компьютерных сетях
ПК-11 (профессиональные компетенции)	способность к подготовке и проведению научно-исследовательских работ в соответствии с профилем ООП магистратуры, с использованием знания фундаментальных и прикладных дисциплин ООП магистратуры
ПК-4 (профессиональные компетенции)	владение современными методами обработки, анализа и синтеза полевой, производственной и лабораторной биологической информации, правилами составления научно-технических проектов и отчетов

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

предмет, методы и основные алгоритмы биоинформатики

2. должен уметь:

работать с базами нуклеотидных, полипептидных и структурных данных

3. должен владеть:

биоинформационными программными инструментами поиска информации в базах данных сравнения последовательностей и структур

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Демонстрировать способность и готовность самостоятельно выбирать подходы и методы биоинформатики для решения конкретных научно-исследовательских и профессиональных задач, самостоятельно получать и анализировать информацию из банков нуклеотидных и полипептидных последовательностей, белковых структур, активно использовать биоинформационные интернет-ресурсы для анализа собственных результатов.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет с оценкой в 5 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практи- ческие занятия	Лабора- торные работы	
1.	Тема 1. Модуль 1. Введение в биоинфоматику	5	1	0	4	0	Устный опрос
2.	Тема 2. Модуль 2. Структурная и сравнительная геномика	5	4-5	0	14	0	Контрольная работа
3.	Тема 3. Модуль 3. Протеомика	5	7-8	0	14	0	Контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	5		0	0	0	Зачет с оценкой
	Итого			0	32	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Модуль 1. Введение в биоинформатику

практическое занятие (4 часа(ов)):

1. Предмет, задачи и объекты биоинформатики. Новейшие достижения в области молекулярной биологии и генетики, вызвавшие необходимость развития биоинформатики. ОМИКСные технологии как источник биологических данных. Информационные технологии, нашедшие применение в биоинформатике. Системный подход в биоинформатике.

Тема 2. Модуль 2. Структурная и сравнительная геномика

практическое занятие (14 часа(ов)):

2. Биоинформационные базы данных. Виды и поиск. Интегрированные базы данных
 Модульная единица 3. Методы сравнения первичных структур молекул биополимеров. Алгоритмы сравнения. Выравнивание, локальное, глобальное. Множественное выравнивание. Модульная единица 4. Филогенетический анализ Проблемы филогении геномных последовательностей. Онтологии генов. Модульная единица 5. Информационное содержание генетических последовательностей. Распознавание участков скрытых периодичностей, повторов, участков статистической неоднородности. Распознавание предковых генов в первичных структурах молекул биополимеров и исследование их функциональности и эволюции. Модульная единица 6. Сравнение целых геномов Предсказание функций генов и поиск структурных и функциональных особенностей геномов на основе сравнения многих геномов.

Тема 3. Модуль 3. Протеомика

практическое занятие (14 часа(ов)):

7. Пространственная структура белков Методы предсказания пространственных структур белков. Механизмы формирования пространственных структур биологических макромолекул. Банки белковых структур Модульная единица 8. Компьютерное моделирование взаимодействия биологических молекул Методы сравнения пространственных структур биологических макромолекул. Методы моделирования взаимодействий между макромолекулярными комплексами. Молекулярная графика. Модульная единица 9. Функциональная геномика. Экспрессия генов и анализ данных микромассивов

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел дисциплины	Се-местр	Неде-ля семе-стра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудо-емкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Модуль 1. Введение в биоинформатику	5	1	подготовка к устному опросу	2	Устный опрос
				подготовка к устному опросу по теме "Информационные технологии, нашедшие применение в биоинформатике. Системный подход в биоинформатике"	6	устный опрос

N	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Модуль 2. Структурная и сравнительная геномика	5	4-5	подготовка к контрольной работе	6	Контрольная работа по сравнению нуклеотидных последовательностей
				подготовка к контрольной работе	6	Контрольная работа по сравнению геномов
				подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа по работе с базами данных в Entrez
3.	Тема 3. Модуль 3. Протеомика	5	7-8	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа по визуализации пространственной структур биомолекул и важных функциональных участков в белковых структурах
				подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа по извлечению и анализу данных из банков по экспрессии генов
	Итого				40	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

В преподавании дисциплины "Биоинформатика" для бакалавров- биологов используется модульно-рейтинговая система с использованием элементов проектного подхода. Каждый модуль включает в себя различные виды аудиторных и самостоятельных занятий, завершается изучение модуля промежуточной аттестацией (контрольная работа, коллоквиум).

В структуре курса существенно преобладает доля практических занятий, которые проводятся в компьютерных классах с использованием интернет-ресурсов, что позволяет выработать у студентов навыки самостоятельной работы на компьютерах, а также применения современных биоинформационных технологий для решения профессиональных задач. На практических занятиях разбираются конкретные ситуации, которые возникают при проведении биологического исследования, студенты учатся выбирать и применять адекватные биоинформационные подходы, работать с биоинформационными банками данных.

Контрольные задания связаны с темами курсовых работ студентов, это повышает их мотивацию к изучению дисциплины. Кроме того, задания контрольных работ связаны между собой, например, по фрагменту нуклеотидной последовательности предлагается определить, принадлежит ли она к кодирующим последовательностям, затем предсказать возможную функцию белка, затем выявить структурные особенности этого белка. Результаты выполненных контрольных заданий должны быть систематизированы в отчете, который оформляется как мини-проект.

Коллоквиумы проводятся в форме группового обсуждения в часы аудиторных занятий.

Внеаудиторные консультации проводятся дистанционно с использованием технологии виртуальных миров в PaxGrid в дни и часы, устанавливаемые преподавателем, при этом такой инновационный формат позволяет проводить консультации как групповые, так и индивидуальные.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Модуль 1. Введение в биоинформатику

Устный опрос , примерные вопросы:

1. Обзор основных биоинформатических баз данных. 2. Основные поисковые системы. 3. Особенности и преимущества поисковой системы Entrez 4. Форматы записей полипептидных и полинуклеотидных последовательностей 5. Как проводить аннотацию последовательностей? 6. Формат файла pdb 7. Порталы протеомной информации 8. Использование биоинформатических баз данных для изучения различных биологических дисциплин. 9. Как найти гомологичные последовательности 10. Основные критерии при работе в BLAST

устный опрос , примеры вопросы:

Вопросы по истории развития компьютерных методов молекулярного моделирования Обзор биологических банков данных

Тема 2. Модуль 2. Структурная и сравнительная геномика

контрольная работа по работе с базами данных в Entrez , примерные вопросы:

Работа проводится на компьютерах, заключается в извлечении нуклеотидных последовательностей заданных белков в нужных форматах

Контрольная работа по сравнению нуклеотидных последовательностей , примерные вопросы:

Работа проводится на компьютерах с использованием он-лайн программ локального и глобального выравнивания. На основании полученной последовательности студент в банке белковых структур должен найти структуру для своего белка, а также предсказать пространственную структуру с помощью биоинформатических серверов. Полученные модели должны быть визуализированы, на структурах моделей должны быть отмечены функционально важные участки. Результаты работы оформляются в виде отчета. Каждому студенту предлагается по полипептидной (полинуклеотидной) последовательности определить функцию белка, организм-источник и обосновать сделанный вывод. Получить ортологичные последовательности и на основании множественного выравнивания выявить важные функциональные аминокислотные участки, домены и мотивы, а также построить и проанализировать филогенетические деревья.

Контрольная работа по сравнению геномов, примерные вопросы:

Работа проводится на компьютерах с использованием он-лайн серверов

Тема 3. Модуль 3. Протеомика

контрольная работа по визуализации пространственных структур биомолекул и важных функциональных участков в белковых структурах, примерные вопросы:

На основании полученной последовательности студент в банке белковых структур должен найти структуру для своего белка, а также предсказать пространственную структуру с помощью биоинформатических серверов. Полученные модели должны быть визуализированы, на структурах моделей должны быть отмечены функционально важные участки. Работа с программами-вьюерами 3D структур белков

контрольная работа по извлечению и анализу данных из банков по экспрессии генов, примерные вопросы:

Работа проводится на компьютерах с использованием он-лайн программ

Итоговая форма контроля

зачет с оценкой (в 5 семестре)

Примерные вопросы к итоговой форме контроля

Для получения зачета с оценкой каждый студент выполняет контрольные задания по извлечению определенных аминокислотных последовательностей, работе с биоинформатическими ресурсами для сравнения последовательностей, предсказанию вторичной и пространственной структуры белков, визуализирует полученную пространственную структуру

1. Предпосылки развития биоинформатики и принципы организации биоинформатических баз данных.
2. Обзор основных биоинформатических баз данных.
3. Основные поисковые системы.
4. Особенности и преимущества поисковой системы Entrez
5. Форматы записей полипептидных и полинуклеотидных последовательностей
6. Как проводить аннотацию последовательностей?
7. Формат файла pdb
8. Порталы протеомной информации
9. Использование биоинформатических баз данных для изучения различных биологических дисциплин.
10. Локальное выравнивание и работа в программе BLAST
11. Методы множественного выравнивания и построение филогенетических деревьев
12. Предсказание вторичной структуры белков
13. Методы предсказания пространственной структуры белка
14. Банк данных белковых структур и формат файла pdb
15. Молекулярный докинг лиганда в структуре белка

7.1. Основная литература:

Глазко В. И. и др. Введение в генетику: биоинформатика, ДНК-технология, генная терапия, ДНК-экология, протеомика, метаболика: учебное пособие: [для студентов биологических и сельскохозяйственных наук]: Изд. 3-е, испр. и доп. - Москва: КУРС, 2018 - 653с.

Леск А. Введение в биоинформатику - Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009 - 318с.

Хаубольд Б. и др. Введение в вычислительную биологию: эволюционный подход - Ижевск: Регулярная и хаотичная динамика, 2011 - 455с. - URL:
http://libweb.kpfu.ru/z3950/bcover/0000688958_con.pdf

Порозов, Ю.Б. Биоинформатика : учебно-методическое пособие / Ю.Б. Порозов. ?
Санкт-Петербург : НИУ ИТМО, 2012. ? 52 с. ? Текст : электронный // Электронно-библиотечная система 'Лань' : [сайт]. ? URL: <https://e.lanbook.com/book/43567>

7.2. Дополнительная литература:

1. Системная компьютерная биология: Монография / Колчанов В.Б., Гончаров С., Лихошвай В.А. - Новосиб.:СО РАН, 2008. - 769 с. ISBN 978-5-7692-0871-3 - Режим доступа:
<http://znanium.com/catalog/product/924675>

2. Исаченко О.В. Введение в информационные технологии - М.: Феникс, -2009, - 237 с.

3. Голицына О.Л., Максимов Н.В., Попов И.И. Информационные системы. - М.: Форум Инфра-М, -2008, - 608 с.

4. Игнасимуту С. Основы биоинформатики. ISBN 978-5-93972-620-7 РХД, 2007 г. 320 с.

5. Ибрагимова, Акберова Н.И. Метилирование генов-супрессоров при раке простаты : Учеб.пособие/Н.И.Акберова, И.И.Ибрагимова. - Казань: Изд-во Казанск.гос.ун-та, 2008. - 33 с.

6. Bioinformatics of genome regulation and structure. Ed. by N.Kolchanov and R. Hofestaedt, Kluwer Academic Publishers, Boston/Dordrecht/London, 2004.

7. Philip E. Bourne, Helge Weissig. Structural Bioinformatics. Wiley-Liss, 2003

8. Mount D.W. Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis. Cold Spring Harbor Laboratory Press 2001.

9. Baxevanis A.D., B. F. Francis Oulette. Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins. Second Edition. Wiley-Interscience, 2001.

7.3. Интернет-ресурсы:

BLAST - <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST>

ClustalW - <http://www.genome.jp/tools/clustalw/>

Entrez - <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez>

Expasy - <http://www.expasy.org/>

Muscle ? множественное сравнение нуклеотидных и аминокислотных последовательностей. - <http://www.drive5.com/muscle/>

PHYLIP ? пакет филогенетических программ - <http://evolution.genetics.washington.edu/phylip.html>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Молекулярное моделирование, работа с базами данных" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента" , доступ к которой предоставлен студентам. Электронная библиотечная система "Консультант студента" предоставляет полнотекстовый доступ к современной учебной литературе по основным дисциплинам, изучаемым в медицинских вузах (представлены издания как чисто медицинского профиля, так и по естественным, точным и общественным наукам). ЭБС предоставляет вузу наиболее полные комплекты необходимой литературы в соответствии с требованиями государственных образовательных стандартов с соблюдением авторских и смежных прав.

Для проведения лекционных занятий необходим учебный класс, оснащенный мультимедийной техникой.

Для проведения практических работ требуется компьютерный класс с доступом в Интернет. Желательный количественный состав на практическом занятии не должен превышать 10 человек.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 06.03.01 "Биология" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Акберова Н.И. _____

Ульянова В.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Ильинская О.Н. _____

Киямова Р.Г. _____

"__" _____ 201__ г.