

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Компьютерные технологии в биологии. Математическое моделирование биологических процессов М1.Б.1

Направление подготовки: 020400.68 - Биология

Профиль подготовки: Микробиология и вирусология

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Акберова Н.И. , Тарасов Д.С.

Рецензент(ы):

Темников Д.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Алимова Ф. К.

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

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:

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

Регистрационный № 849446014

Казань

2014

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 и биотехнологии отделение биологии и биотехнологии , Natasha.Akberova@kpfu.ru ; Тарасов Д.С.

1. Цели освоения дисциплины

знакомство со способами математической формализации биологических процессов; с основными приемами моделирования сложных биологических систем и методов анализа моделей, обсуждение применения различных вычислительных схем расчета моделей; знакомство с классическими моделями в биологии и демонстрация значения математического и компьютерного моделирования для понимания природы биологических процессов и функционирования биологических систем

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.Б.1 Общенаучный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

При изучении данного курса используются знания и навыки, полученные при изучении курсов "Информатика и программирование", "Дополнительные главы математики".

Полученные знания и навыки используются при выполнении курсовых и выпускной квалификационной работ.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|--|---|
| ПК-6 (профессиональные компетенции) | творчески применяет современные компьютерные технологии при сборе, обработке, анализе и передаче биологической информации; |
| ОК-6 (общекультурные компетенции) | способен самостоятельно приобретать информацию с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности |
| ПК-3 (профессиональные компетенции) | самостоятельно анализирует имеющуюся информацию, выявляет фундаментальные проблемы, ставит задачу и выполняет полевые, лабораторные биологические исследования для решения конкретных задач по специализации с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, демонстрирует ответственность за качество работ и научную достоверность результатов; |

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные принципы функционального программирования и базовые конструкции языков функционального программирования на F#

2. должен уметь:

- разрабатывать программы средней сложности с использованием F#

3. должен владеть:

- представлениями о различных способах мышления в программировании и парадигмах программирования, о языках логического и функционального программирования, их особенностях;

1

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять навыки программирования для решения биологических задач

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять навыки программирования для решения биологических задач

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять навыки программирования для решения биологических задач

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять навыки программирования для решения биологических задач

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен во 2 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 | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 1. | Тема 1. Тема 1. Языки программирования, характеристика, назначение, применение в биологии | 2 | 1-2 | 0 | 4 | 0 | КОЛЛОКВИУМ |
| 2. | Тема 2. Тема2. Язык программирования Python | 2 | 3-5 | 0 | 6 | 0 | КОЛЛОКВИУМ |
| 3. | Тема 3. Тема3. Обработка данных с помощью языка R | 2 | 6-9 | 0 | 8 | 0 | контрольная работа |
| 4. | Тема 4. Тема 4. От последовательности генома к его функции | 2 | 10-11 | 0 | 10 | 0 | контрольная работа |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 5. | Тема 5. Тема 5. Математическое моделирование метаболических путей | 2 | 12 | 0 | 4 | 0 | контрольная работа |
| 6. | Тема 6. Тема6. Введение в системную биологию | 2 | 13 | 0 | 4 | 0 | контрольная работа |
| | Тема . Итоговая форма контроля | 2 | | 0 | 0 | 0 | экзамен |
| | Итого | | | 0 | 36 | 0 | |

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Тема 1. Языки программирования, характеристика, назначение, применение в биологии

практическое занятие (4 часа(ов)):

Классификации языков программирования; языки программирования Java, C#, Perl, C, C++, Python, R; языки разметки - XML; программно-аппаратная архитектура параллельных вычислений - CUDA, приложения для биологических задач;

Тема 2. Тема2. Язык программирования Python

практическое занятие (6 часа(ов)):

Знакомство с языком Python, описание, интерпретатор. установка и запуск.Функции, переменные. Объекты, строки, векторы. списки, кортежи, словари, массивы. Модули.

Тема 3. Тема3. Обработка данных с помощью языка R

практическое занятие (8 часа(ов)):

Работа в RStudio. Установка и запуск, загрузка данных. Базовые объекты: вектор, список, матрица. Первичная обработка данных, сводки и таблицы. графики, подмножества. Выборочные распределения и доверительные интервалы. Анализ качественных и количественных признаков.

Тема 4. Тема 4. От последовательности генома к его функции

практическое занятие (10 часа(ов)):

Банки данных NCBI. Парное выравнивание. BLAST. Множественное выравнивание, серверы. Биоинформационные инструменты для анализа последовательностей. Моделирование вторичной структуры белков, методы, программы. Protein Data Bank, формат записей, визуализация структур. Моделирование пространственной структуры белков, методы, программные реализации. Моделирование взаимодействия биологических макромолекул и лигандов.

Тема 5. Тема 5. Математическое моделирование метаболических путей

практическое занятие (4 часа(ов)):

Метаболомика. Базы данных по метаболическим системам: обзор возможностей, примеры, . KEGG PATHWAYS, инструменты анализа (pathways mapping).

Тема 6. Тема6. Введение в системную биологию

практическое занятие (4 часа(ов)):

Введение в системную биологию. Построение сетей взаимодействия генов (белков). Биоинформационные инструменты построения и анализа сетей.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|---|---------|--------------------|--|---------------------------|---|
| 1. | Тема 1. Тема 1. Языки программирования, характеристика, назначение, применение в биологии | 2 | 1-2 | подготовка к коллоквиуму | 12 | коллоквиум |
| 2. | Тема 2. Тема2. Язык программирования Python | 2 | 3-5 | подготовка к коллоквиуму | 12 | коллоквиум |
| 3. | Тема 3. Тема3. Обработка данных с помощью языка R | 2 | 6-9 | подготовка к контрольной работе | 12 | контрольная работа |
| 4. | Тема 4. Тема 4. От последовательности генома к его функции | 2 | 10-11 | подготовка к контрольной работе | 12 | контрольная работа |
| 5. | Тема 5. Тема 5. Математическое моделирование метаболических путей | 2 | 12 | подготовка к контрольной работе | 12 | контрольная работа |
| 6. | Тема 6. Тема6. Введение в системную биологию | 2 | 13 | подготовка к контрольной работе | 12 | контрольная работа |
| | Итого | | | | 72 | |

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При освоении дисциплины предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. В обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет. В курсе запланирована активная работа в компьютерном классе. Желательно также, чтобы студентам была предоставлена возможность удаленного доступа к ресурсам на вычислительном кластере.

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

Тема 1. Тема 1. Языки программирования, характеристика, назначение, применение в биологии

коллоквиум , примерные вопросы:

Проводится в форме беседы по вопросам темы 1: - Классификации языков программирования - Объектно-ориентированные языки программирования, характеристика, назначение - Примеры применения программирования в биологии

Тема 2. Тема2. Язык программирования Python

коллоквиум , примерные вопросы:

Проводится в форме беседы по вопросам темы 2: - Особенности языка программирования Python? Основная философия языка программирования Python? - Какие по сложности бывают типы данных? Как преобразовать один тип данных в другой? Какой процедурой узнать тип используемых данных? - Перечислите арифметические операции с примерами. - В каких кавычках представлен тип String? Приведите примеры использование тройных кавычек - Какой приоритет выполнения арифметических операций для Python?

Тема 3. Тема3. Обработка данных с помощью языка R

контрольная работа , примерные вопросы:

Загрузка данных в R и RStudio, поднаборы данных, статистическая разведка. Построение графиков. Описание и сравнение данных в R. Модули для биологов. Примеры задач Загрузите в рабочее пространство R базу данных cdc опроса респондентов (<http://www.openintro.org/stat/data/cdc.R>). - Сколько наблюдений и переменных в этом фрейме данных? Какие переменные содержит этот фрейм? - Какого типа переменная genhlth (weight,smoke100,hlthplan, height, weight, wtdesire, age, gender)? - Отличается ли вес мужчин старше 50 лет и младше 50 лет? Результат представьте графически - Охарактеризуйте рост и вес респондентов относительно состояния здоровья (genhlth). Результат представьте графически -

Тема 4. Тема 4. От последовательности генома к его функции

контрольная работа , примерные вопросы:

Экспорт последовательностей (полинуклеотидных и полипептидных) из баз данных и их анализ. Моделирование вторичной структуры белка. Экспорт структур биологических макромолекул и комплексов из PDB, их визуализация и анализ. Примеры задач: - На основании предложенной полинуклеотидной (полипептидной) последовательности определить ее функцию. Оценить достоверность вывода - Получить полипептидную последовательность определенного фермента мыши (дрожжей, человека), построить на ее основании вторичную структуру, используя он-лайн серверы, оценить достоверность предсказания элементов вторичной структуры, визуализировать результат - Из банка данных получить файл с координатами атомов в кристаллической структуре определенного белка, визуализировать пространственную структуру этого белка, выделить аминокислотные остатки активного центра

Тема 5. Тема 5. Математическое моделирование метаболических путей

контрольная работа , примерные вопросы:

Работа с KEGG, картирование метаболических путей, интерпретация результатов Примеры задач: - На основании предложенной полинуклеотидной (полипептидной) последовательности найти ортологов и паралогов. Определить, каковы сходства и отличия биохимических реакций, в которых они задействованы - Определить ортологичные последовательности для предложенного полипептида, определить филогенетическое родство ортологов, построить дерево. Определить пути биохимических реакций, в которых задействованы полученные ортологи. Сопоставить филогенетические постоения и роль в метаболизме

Тема 6. Тема6. Введение в системную биологию

контрольная работа , примерные вопросы:

Построение сетей взаимодействий между белками и их анализ Примеры задач: - Определите, с чем взаимодействует продукт такого-то гена, постройте сеть взаимодействия - Определите топологию сети взаимодействия заданных белков. - Определите уровень экспрессии определенных белков в различных тканях

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Программа экзамена.

Вопросы для экзамена:

- Публичные базы данных и инструментарий: NCBI, EBI, KEGG, SwissProt, PDB
- Формат записей в банках данных последовательностей
- Сравнение последовательностей
- Локальное и глобальное выравнивание

- Множественное выравнивание- Молекулярная филогения
- Формат записей в PDB
- Визуализация структур биомолекул
- Анализ полинуклеотидных и полипептидных последовательностей
- Методы предсказания функции по первичной последовательности
- Методы предсказания вторичной структуры белка
- Методы предсказания пространственной структуры белка
- Визуализация пространственной структуры белка
- Оценка качества пространственных структур биологических макромолекул
- Классификация языков программирования
- Язык программирования R: структура и назначение
- Представление данных в R и работа с ними
- Процедура бутстрата в R
- Python: характеристика и приложения
- Работа с функциями в Python
- Работа со строками и списками в Python

7.1. Основная литература:

1. Гибридные и синергетические интеллектуальные системы: теория и практика : материалы 1-го международного симпозиума [Электронный ресурс] / под ред.проф. А.В.Колесникова. - Калининград: Изд-во БФУ им.И.Канта, 2012. - 227с. - Режим доступа:
http://www.bibliorossica.com/book.html?currBookId=6876&ln=ru&search_query=биоинформатика
2. Братусь, А.С. Динамические системы и модели биологии [Электронный ресурс] / А.С. Братусь, А.С. Новожилов, А.П. Платонов. - М.: Физматлит, 2010. - Режим доступа:
<http://e.lanbook.com/view/book/2119>
3. Леск, А. Введение в биоинформатику [Текст] / А. Леск; пер. с англ. под ред. д.б.н., проф. А.А. Миронова и д.х.н., проф. В.К. Швядаса. - Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009 - 318 с.

7.2. Дополнительная литература:

1. Каймин, В.А. Информатика: Учебник [Электронный ресурс] / В.А. Каймин. - Министерство образования РФ. - 6-е изд. - М.: ИНФРА-М, 2010. . - Режим доступа:
<http://znanium.com/bookread.php?book=224852>

7.3. Интернет-ресурсы:

- Python - <https://www.python.org/>
Statistical Computing - <http://www.r-project.org/>
VMD - www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/
Базы данных NCBI - <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
Портал биоинформационных ресурсов - <http://www.expasy.org/tools/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Компьютерные технологии в биологии. Математическое моделирование биологических процессов" 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.

Компьютерный класс, оборудованный мультимедийной техникой и выходом в Интернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по
направлению 020400.68 "Биология" и магистерской программе Микробиология и вирусология .

Автор(ы):

Акберова Н.И. _____

Тарасов Д.С. _____

"__" 201__ г.

Рецензент(ы):

Темников Д.А. _____

"__" 201__ г.