

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»
ИНСТИТУТ ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебно-методической работе



профессор Елина Е.Г.

2016 г.

**Рабочая программа дисциплины
БИОИНФОРМАТИКА**

Направление подготовки
03.03.02 "Физика"

Профиль подготовки
Медицинская физика

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов
2016

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Биоинформатика» являются формирование у студентов общекультурных и общепрофессиональных компетенций: владения теорией и навыками практической работы в области химии синтетических и природных биологически активных веществ и биотехнологии; понимания принципов организации современных биоинформационных ресурсов и методов работы с ними в интерактивном и автономном режиме с использованием персональных компьютеров; умения извлекать сведения о структуре и функциях биологических молекул для их использования в научных исследованиях; представления о наиболее актуальных направлениях развития биоинформатики в постгеномную и метагеномную эпоху, владения навыками мышления, позволяющими принимать собственные решения на основании полученных базовых знаний в области биоинформатики.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Биоинформатика» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы и изучается студентами дневного отделения факультета нано- и биомедицинских технологий СГУ, обучающимися по направлению 03.03.02 "Физика" по профилю подготовки "Медицинская физика" в течение 6 учебного семестра.

К «входным» знаниям, умениям и готовностям обучающегося, необходимым при усвоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин, относятся: сведения о фундаментальных принципах и химических основах биологических процессов; базовые представления биологической и медицинской химии; умение использовать полученные знания для объяснения результатов научных экспериментов; владение современными средствами компьютерной обработки научных данных; знание систем сбора, обработки и хранения научной информации.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Биоинформатика»

В результате освоения дисциплины «Биоинформатика» выпускник должен овладеть следующей компетенцией:

ОПК-1: Способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке).

В результате освоения дисциплины студент должен: **знать**:

- основные понятия, цели и задачи биоинформационного анализа (состав и организация баз данных по биологическим последовательностям и молекулярным структурам, принципы навигации по биоинформационным ресурсам);

- интерактивные и локальные средства компьютерной обработки биоинформационных данных (поиск и локализация генетических и белковых структур в геномах и протеомах, парные и множественные выравнивания последовательностей, их использование для предсказания структуры и прогнозирования функций изучаемых биологических и биологически активных молекул, молекулярное моделирование и молекулярная филогения);

уметь:

- отыскивать и анализировать профильную научную литературу, в том числе с применением специализированных биоинформационных баз данных PubMed и Medline;
- проводить компьютерный анализ биологических и биологически активных веществ с применением накопленных в обширных базах данных результатов соответствующих экспериментальных исследований;
- делать выводы и прогнозы, формулировать предложения по применению полученных сведений в будущей профессиональной деятельности;
- вести научную дискуссию по проблемам биоорганической химии и биотехнологии с использованием полученных знаний из междисциплинарных областей (геномики, протеомики, метаболомики и т.п.);

владеть:

- основными приемами биоинформационного анализа с использованием компьютерной техники;
- методологией научного творчества.

4. Структура и содержание дисциплины «Биоинформатика»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа).

Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Раздел дисциплины	Се- мestr	Неделя семе- стра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студен- тов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успевае- мости (по неделям семестра). Формы промежу- точной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Лабо- рат. раб.	СРС	Всего	
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
1.	Вводная часть: общие цели и задачи биоинформационного анализа, основные направления и характерные примеры применения в биомедицинских и биотехнологических исследованиях.	6	1-4	8		6	14	Заслушивание и обсуждение рефератов
2.	Главные объекты, средства и приемы биоинформационного анализа.	6	5-6	4		3	7	Разбор конкретных ситуаций
3.	Базы данных генетических и белковых последовательностей, их использование для изучения отдельных молекул ДНК и белков, клеточных метаболитов.	6	7-11	9		7	16	Заслушивание и обсуждение рефератов
4.	Сходство между биологическими последовательностями, его значение для прогнозирования структуры и свойств изучаемых молекул, эволюционных связей между биологическими видами; попарные локальные и глобальные выравнивания последовательностей, основы технологии	6	11-13	4		3	7	Разбор конкретных ситуаций

4.1. Содержание дисциплины «Биоинформатика»

1. Биология *in silico*: от истоков до наших дней. Основные объекты, цели и средства биоинформатики. Предпосылки к возникновению и развитию биоинформатики. Геном человека, его общие и сравнительные характеристики. Современные «постгеномные» проекты. Основное предназначение биоинформационного анализа. Главные ресурсы по биоинформатике нуклеиновых кислот и белков. Сравнения последовательностей – важнейший инструмент биоинформационного анализа. Моделирование пространственных структур белков (белковый фолдинг). Биологические последовательности и молекулярная филогения.
2. ДНК – полимер кодирующий жизнь. Вычислительная геномика – базовая составляющая биоинформатики. Секвенирование ДНК и компьютерный анализ генетической информации. Геномика и здоровье человека. Физические размеры геномной ДНК, основные типы биоинформационных баз данных. Метагеномика – обширная геномная информация из окружающей среды. Сравнительный анализ молекулярных последовательностей. Множественное выравнивание последовательностей – основа структурного и филогенетического анализа.
3. Чарльз Дарвин и биологическая эволюция. Традиционный и современный филогенетический анализ. Теория Дарвина и самоорганизация открытых систем. Происхождение жизни: палеонтологические данные и биоинформационный анализ. Эволюционные процессы в реальном масштабе времени – долгосрочный микробиологический эксперимент. Современные представления об эволюционных процессах.
4. О горизонтальном переносе генов. Роль горизонтального переноса генов в эволюционных процессах. Значение симбиозов в эволюции живой материи. Геном и эволюционное происхождение бактерий рода азоспирилл. О содержимом генома человека.
5. Структура биомакромолекул и биологические последовательности: последовательности белков; последовательности ДНК; последовательности РНК. Превращение ДНК в белковую последовательность. Полные геномы организмов. Повторы в последовательностях ДНК. Геномная дактилоскопия.
6. PubMed/Medline – важнейший биоинформационный ресурс. UniProt – лучшая отправная точка для получения представлений о белках и их генах. Основное содержание записи UniProt. Отыскание последовательностей ДНК – GenBank как «запоминающее устройство» молекулярной биологии. Основное содержание записи GenBank. Поиск похожих последовательностей с использованием технологии BLAST. Множественные выравнивания последовательностей.
7. О структуре геномов и генов. Принципиальные отличия геномной организации про- и эукариот. Отыскание и использование записей в

- GenBank. Использование геноцентрических баз данных. Полногеномные базы данных вирусов и микробов. Исследование генома человека с использованием базы данных и геномного браузера ENSEMBL.
8. От генетической последовательности к зрелому белку: посттрансляционные модификации (ПТМ) – инсулин. От гена к функциональному белку: ПТМ – общие положения. Все о химической модификации аминокислот. О биоинформационных ресурсах белков. Более подробно о содержимом записей в базе данных UniProt – эпидермальный фактор роста и его рецептор (EGFR). Метаболические пути и их биоинформационные ресурсы. О белковых семействах.
 9. Технология рекомбинантной ДНК и клонирование генов. ПЦР-амплификация ДНК. Компьютерная чистка результатов клонирования ДНК. Переваривание ДНК в компьютере (рестрикционный анализ). Конструирование праймеров для ПЦР. Общий анализ состава ДНК.
 10. Отыскание генов в последовательностях ДНК. Особенности поиска генов у про- и эукариотов. Полногеномное секвенирование и сборка геномов. Определение физико-химических характеристик белков по их последовательностям. Анализ локальных свойств белковых последовательностей. Предсказание структурно-функциональных свойств белков поиском шаблонов на примере программы PROSITE.
 11. Обнаружение доменов в белковых последовательностях. Использование доменов для предсказания функций белков. Анализ сходства между биологическими последовательностями. Сходство, идентичность и гомология последовательностей. Технология BLAST в поиске гомологий. Бластинг белковых последовательностей.
 12. Об аналогах биоинформатики в других отраслях знаний. Бластинг последовательностей ДНК. Биология *in silico* на основе технологии BLAST. Интерактивный поиск отдаленно-родственных гомологов с использованием программы PSI-BLAST. Парные сравнения биологических последовательностей. Метод точечных матриц. Программа Dotlet.
 13. Расширенный дот-плот анализ последовательностей с программой Dotlet. Парные выравнивания последовательностей. Локальные выравнивания с программами BLAST и Lalign. Множественные выравнивания последовательностей (МВП) и задачи, решаемые с их использованием. Выбор последовательностей, подходящих для реализации методов МВП. МВП белков, содержащих домен EF-hand, и его использование в филогенетическом анализе. Российский интегрированный пакет программ биоинформационного анализа UniproUGENE.
 14. Разнообразие методов получения МВП. Комплектование набора по-

следовательностей белков на сайте UniProt. Семейство программ Clustal как базовое средство получения МВП. Принципы работы программ Clustal. Семейство программ Tcoffee и решаемые в нем задачи получения и анализа МВП. Оценки надежности получаемых биологических сигналов в МВП с использованием отдаленно родственных последовательностей. К вопросу о внеземном происхождении жизни (новейшие данные).

15. Варианты представления МВП для анализа их деталей. Общие рекомендации по работе с МВП. Форматы МВП и их преобразования. Редактирование и анализ МВП с помощью программы Jalview. Подготовка МВП к опубликованию с помощью программы Vохshade. Визуализация МВП в виде логотипа. Предсказание структуры белка по его последовательности. Белковый банк данных PDB и его ресурсы.
16. О толковании термина «data reduction» применительно к биоинформатике и о бета-спиралях белков. Предсказание 3D структуры белка методом гомологичного моделирования. Выяснение особенностей строения белка по результатам гомологичного моделирования его 3D структуры. Автоматизированное гомологичное моделирование с использованием сервера SWISS-MODEL. Альтернативные методы моделирования структуры и свойств белков. Биоинформационный анализ РНК. Предсказание вторичной структуры РНК.
17. Поиск в базах данных не кодирующих РНК (т-РНК, микро-РНК, рибосомальные РНК). Цели и задачи молекулярной филогении. Подготовка данных для молекулярно-филогенетического анализа. Основные методы построения филогенетических деревьев. Построение филогенетических деревьев с использованием алгоритма объединения соседей в программах ClustalW и Phylip. Интерпретация результатов филогенетического анализа и оценка его качества с применением бутстрепинга. Построение филогенетических деревьев с использованием алгоритма максимального правдоподобия в программе PhyML.
18. Возможности и ограничения филогенетических исследований прокариотов с применением технологии 16S рРНК, альтернативные подходы. Пример использования последовательности гена 16S рРНК в идентификации бактериального штамма, изолированного из прикорневой системы растений картофеля. Микроэррей как средство массового анализа экспрессии генов. Роль биоинформационного анализа в развитии современных биотехнологий.

Примерная тематика практических занятий (семинаров)

1. Секвенирование ДНК и компьютерный анализ генетической информации.
2. О содержимом генома человека. Роль горизонтального переноса генов в эволюционных процессах.

3. Структура биомакромолекул и биологические последовательности. Полные геномы организмов.
4. PubMed/Medline, UniProt и GenBank – важнейшие биоинформационные ресурсы.
5. Принципиальные отличия геномной организации про- и эукариот. Исследование генома человека с использованием базы данных и геномного браузера ENSEMBL.
6. Посттрансляционные модификации в созревании белков..
7. Технология рекомбинантной ДНК и клонирование генов. ПЦР-амплификация ДНК и конструирование праймеров для ПЦР.
8. Использование доменов для предсказания функций белков. Сходство, идентичность и гомология последовательностей. Технология BLAST в поиске гомологий.
9. Интерактивный поиск отдаленно-родственных гомологов с использованием программы PSI-BLAST. Парные сравнения биологических последовательностей. Метод точечных матриц.

5. Образовательные технологии

При изучении дисциплины «Биоинформатика» реализуются различные виды учебной работы: лекции, самостоятельные работы, работа над рефератами и выступление с ними перед студенческой аудиторией, оппонирование работ и дискуссии по темам рефератов. В рамках курса активно используются инновационные материалы: интерактивные средства доступа к биоинформационным базам данных и программам работы с ними, мультимедийные презентации и электронные образовательные ресурсы.

При изучении дисциплины «Биоинформатика» инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья следует применять следующие адаптивные технологии: наличие комплексной информационной системы (визуальной, звуковой, тактильной) для ориентации и навигации инвалидов в архитектурном пространстве образовательной организации, использование социально-активных рефлексивных методов обучения для создания комфортного психологического климата в студенческой группе, использование дистанционных технологий при реализации программы, работа по индивидуальному плану.

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

Самостоятельная работа студентов включает освоение теоретического материала и его реализация в биоинформационных исследованиях с применением компьютеров и глобальных сетевых ресурсов.

Оценочные средства текущего контроля включают:

- разбор конкретных ситуаций;
- оценку личностных качеств студента (исполнительность, инициативность).

Промежуточная аттестация студентов производится в форме зачета с оценкой.

Вопросы по дисциплине

10. Основные объекты, цели и средства биоинформатики. Главные ресурсы по биоинформатике нуклеиновых кислот и белков.
11. Секвенирование ДНК и компьютерный анализ генетической информации. Метагеномика – обширная геномная информация из окружающей среды.
12. Чарльз Дарвин и биологическая эволюция. Традиционный и современный филогенетический анализ.
13. О содержимом генома человека. Роль горизонтального переноса генов в эволюционных процессах.
14. Структура биомакромолекул и биологические последовательности. Полные геномы организмов.
15. PubMed/Medline, UniProt и GenBank – важнейшие биоинформационные ресурсы. Поиск похожих последовательностей с использованием технологии BLAST.
16. Принципиальные отличия геномной организации про- и эукариот. Исследование генома человека с использованием базы данных и геномного браузера ENSEMBL.
17. Посттрансляционные модификации в созревании белков. Метаболические пути и их биоинформационные ресурсы. О белковых семействах.
18. Технология рекомбинантной ДНК и клонирование генов. ПЦР-амплификация ДНК и конструирование праймеров для ПЦР.
19. Особенности поиска генов в последовательностях ДНК про- и эукариотов. Полногеномное секвенирование и сборка геномов.
20. Использование доменов для предсказания функций белков. Сходство, идентичность и гомология последовательностей. Технология BLAST в поиске гомологий.
21. Интерактивный поиск отдаленно-родственных гомологов с использованием программы PSI-BLAST. Парные сравнения биологических последовательностей. Метод точечных матриц.
22. Множественные выравнивания последовательностей (МВП) и задачи, решаемые с их использованием. Выбор последовательностей, подходящих для реализации методов МВП.
23. Разнообразие методов получения МВП. Семейство программ Clustal как базовое средство получения МВП. Принципы работы программ Clustal.
24. Варианты представления МВП для анализа их деталей. Толкование термина «data reduction» применительно к биоинформатике. Визуализация МВП в виде логотипа.
25. Предсказание 3D структуры белка методом гомологичного моделирования. Альтернативные методы моделирования структуры и свойств белков. Биоинформационный анализ РНК.

26. Цели и задачи молекулярной филогении. Основные методы построения филогенетических деревьев. Интерпретация результатов филогенетического анализа и оценка его качества с применением бутстрепинга.
27. Возможности и ограничения филогенетических исследований прокариотов с применением технологии 16S рРНК, альтернативные подходы. Микроэррей как средство массового анализа экспрессии генов.

Разбор конкретных ситуаций

1. От генетической последовательности к зрелому белку: посттрансляционные модификации на примере инсулина человека.
2. О содержимом записей в базе данных UniProt – эпидермальный фактор роста и его рецептор (EGFR).
3. Сравнение результатов МВП, полученных разными методами, на примере семейства парвальбуминов.
4. Пример использования последовательности гена 16S рРНК в идентификации бактериального штамма, изолированного из прикорневой системы растений картофеля.

Темы рефератов

1. Геном человека и современные постгеномные проекты.
2. Геномная дактилоскопия.
3. Бластинг последовательностей нуклеиновых кислот и белков.
4. Конструирование праймеров для ПЦР.
5. Использование доменов для предсказания структуры и функций белков.
6. Методы предсказания 3D структуры белков.
7. Молекулярная филогения как средство изучения эволюционных взаимосвязей между биологическими видами.
8. Микроэррей как средство массового анализа экспрессии генов.
9. Российский интегрированный пакет программ биоинформационного анализа UniproUGENE.

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности
6 семестр

1	2	3	4	5	6	7	7	9
Се- местр	Лек- ции	Лабора- торные занятия	Практиче- ские заня- тия	Самостоя- тельная ра- бота	Автоматизиро- ванное тести- рование	Другие виды учебной деятель- ности	Промежу- точная ат- тестация	Ито- го

6	15	0	20	35: рефераты – 20; разбор конкрет- ных си- туаций – 15.	0		30	1 0 0
---	----	---	----	--	---	--	----	-------------

Примерная программа оценивания учебной деятельности студента

Лекции

Посещаемость, опрос, активность и др. за один семестр – от 0 до 15 баллов.

Диапазон баллов	Критерий оценки
0 баллов	Посещение менее 7 лекционных занятий (менее 39%)
1-3 балла	Посещение 7-10 лекционных занятий (39-56%)
4-7 баллов	Посещение 11-14 лекционных занятий (61-78%)
8-12 баллов	Посещение 15-18 лекционных занятий (83-100%)
13-15 баллов	Посещение 15-18 лекционных занятий (83-100%) и участие в лекционных дискуссиях

Лабораторные занятия

Не предусмотрены.

Практические занятия

Посещаемость, опрос, активность и др. за один семестр – от 0 до 20 баллов.

Самостоятельная работа

Учебно-исследовательская работа (рефераты) (от 0 до 20 баллов)

	0	1-5	6-10	11-15	16-20
Учебно-исследовательская работа	Работа не выполнена	Материал в работе подобран не корректно, тема до конца не раскрыта	Материал соответствует теме работы, но оформлен не в соответствии с правилами и отсутствует творческая часть работы	Материал соответствует теме работы, оформлен в соответствии с правилами и доложен, но отсутствует творческая часть работы	Материал соответствует теме работы, содержит творческие элементы самостоятельно проведенного исследования, оформлен в соответствии с правилами и доложен.

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено.

Дополнительно

1. Разбор конкретных ситуаций №1 (от 0 до 15 баллов)
2. Разбор конкретных ситуаций №2 (от 0 до 15 баллов)
3. Разбор конкретных ситуаций №3 (от 0 до 15 баллов)
4. Разбор конкретных ситуаций №4 (от 0 до 15 баллов)

	0	1-5	6-10	11-15
Разбор конкретных ситуаций (4)	Не работал	Принимал участие в дискуссии, приводя уточняющие дополнения (менее 50% аудиторного времени)	Участвовал в дискуссии, работая 50-79% аудиторного времени	Участвовал в дискуссии, работая более 80% аудиторного времени

Промежуточная аттестация

Зачет - от 0 до 30 баллов:

- ответ на «зачтено» – 16-30 баллов
- ответ на «не зачтено» – 0-15 баллов

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за один семестр по дисциплине составляет 100 баллов.

Пересчет полученной студентом суммы баллов по дисциплине в оценку (зачет) осуществляется в соответствии с таблицей 2:

Таблица 2. Пересчет полученной студентом суммы баллов в оценку (зачет)

60 баллов и более	«зачтено»
менее 60 баллов	«не зачтено»

Текущие индивидуально набранные студентами баллы доводятся до их сведения 2 раза за семестр: в конце 7 и 14 недель обучения.

Оценка (зачет) студентам, успешно прошедшим обучение по дисциплине, может быть проставлена без сдачи ими теоретического зачета на основании рейтинговой оценки по решению преподавателя.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Биоинформатика»

Основная литература

1. Леск А.М. Введение в биоинформатику / А. Леск ; пер. с англ. под ред. А. А. Миронова, В. К. Швядоса. - 2-е изд. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. - 318, [2] с. : ил., табл. (15 экз. в НБ СГУ).

Дополнительная литература

1. Гасфилд, Дэн. Строки, деревья и последовательности в алгоритмах: Информатика и вычислительная биология. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2003. 653 с.
2. Эллиот В., Эллиот Д. Биохимия и молекулярная биология. М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2002. 446 с.



Интернет-ресурсы

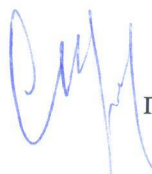
1. Prof. A.N. Ogurtsov. Биоинформатика. Огурцов А.Н. Основы биоинформатики. Харьков: НТУ «ХПИ», 2013. 400 с.; Огурцов А.Н. Выравнивание белковых последовательностей. Харьков: НТУ «ХПИ», 2015. 80 с.: [Электронный документ] (<https://sites.google.com/site/anogurtsov/lectures/bi>). Проверено 30.06.2015.
2. Unipro UGENE: [Электронный документ] (<http://ugene.unipro.ru/ru>). Проверено 30.06.2015.
3. Институт биоинформатики: [Электронный документ] (<http://bioinformaticsinstitute.ru/>). Проверено 30.06.2015.
4. Введение в биоинформатику: [Электронный документ] (<https://www.coursera.org/course/bioinfo>). Проверено 30.06.2015.
5. Bio-Linux Overview: [Электронный документ] (<http://environmentalomics.org/bio-linux>). Проверено 30.06.2015.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Биоинформатика»

1. Аудитория для чтения лекций, оснащенная мультимедийным проектором.
2. Персональные компьютеры.
3. Сетевые поисковые системы, электронные библиотеки, серверы издательств научной литературы и другие информационные ресурсы Интернета.
4. Научные библиотеки СГУ и ИБФРМ РАН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 03.03.02 "Физика" и профилем подготовки " Медицинская физика ".

Автор



проф. д.х.н. Щеголев С.Ю.

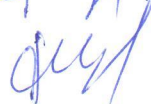
Программа одобрена на заседании кафедры органической и биоорганической химии (протокол № 2 от 8.09 2016 года).

Зав. кафедрой органической
и биоорганической химии



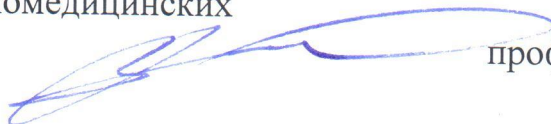
проф. Федотова О.В.

Директор Института химии СГУ



проф. Федотова О.В.

Декан факультета нано- и биомедицинских
технологий, профессор



проф. С.Б. Вениг