

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

Согласовано

Декан ФЕН

Резников В.А.

_____ *подпись*

«___» _____ 20___ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Современные проблемы биологии: биоинформатика структур макромолекул

направление подготовки: 06.04.01 Биология

направленность (профиль): Информационная биология

Форма обучения: очная

Разработчики:

к.б.н., доцент Иванисенко В.А.

к.т.н., Деменков П.С.

к.б.н., Иванисенко Н.В.

Зав.каф. информационной биологии
академик РАН, Колчанов Н.А.

Руководитель программы:

д.б. н., профессор Шестопалова Л.В.

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	6
5. Перечень учебной литературы	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся..	7
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	7
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	8
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	8
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	9
Приложение 1 Аннотация по дисциплине	
Приложение 2 Оценочные средства по дисциплине	

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
	знать	уметь	владеть
ОК-1 Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу		- решать различные задачи (учебные или возникающие в процессе исследовательской работы) с использованием базовых знаний по дисциплине, способность делать выводы из имеющихся данных (теоретических, экспериментальных), позволяющие прийти к решению проблемы учебного или практического плана	навыками: - решения типовых задач по дисциплине; способность формулировать выводы из полученных обучающимся экспериментальных данных
ОПК-3 Готовность использовать фундаментальные биологические представления в сфере профессиональной деятельности для постановки и решения новых задач	- основные принципы анализа и теоретические основы базовых методов метагеномного анализа; - современные методы метагеномного анализа с использованием геномных прочтений		- навык самостоятельного анализа имеющейся информации
ОПК-4 Способность самостоятельно анализировать имеющуюся информацию, выявлять фундаментальные проблемы, ставить задачу и выполнять полевые, лабораторные	- программное обеспечение, необходимое для обработки экспериментальных результатов и оформления этих результатов в виде отчетов, статей и т. п.	- проводить анализ прочтений с помощью бесплатных программных ресурсов	- навык корректного интерпретирования экспериментального материала

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
	знать	уметь	владеть
биологические исследования при решении конкретных задач с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, нести ответственность за качество работ и научную достоверность результатов			
ОПК-7 Готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач	- методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий, необходимые для освоения дисциплин профессионального цикла; - современные методы статистической обработки биологических экспериментальных данных		- современными компьютерными технологиями при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации
ПК-1 Способность творчески использовать в научной и производственно-технологической деятельности знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин (модулей), определяющих		- применять на практике базовые теоретические знания современной биологии, методологии современных биологических исследований; новейших достижений в области	

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
	знать	уметь	владеть
направленность (профиль) программы магистратуры		биологических исследований; - использовать теоретические знания и экспериментальные навыки для самостоятельного планирования и проведения эксперимента, анализа и оформления полученных результатов	
ПК-4 Способность генерировать новые идеи и методические решения	- основные теории, концепции и принципы в избранной области деятельности		- приемами и методами для выполнения и решения новых идей; - навыками составления творческих проектов
ПК-7 Готовность осуществлять проектирование и контроль биотехнологических процессов	- основы проектирования и методы контроля биотехнологических процессов	- формулировать проблему и предлагать пути ее решения с использованием биотехнологических методов и подходов	- навыком самостоятельного осуществления проектирования биотехнологических процессов и поиска методов решения практических задач, применения различных методов познания

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины
Современные проблемы биологии: биоинформатика структур макромолекул:

- Генетика (весь круг вопросов, связанных с явлением наследственности и изменчивости)
- Молекулярная биология (молекулярные механизмы реализации генетической информации, репликации, репарации);
- Эволюционное учение (механизмы возникновения полиморфизма и факторы, формирующие изменчивость в популяциях);

- Биометрия, Теория вероятности и математическая статистика (случайные величины, моменты распределений, тестирование гипотез, ошибки первого и второго рода)
- Математика и статистика (статистический анализ данных и методы машинного обучения; геометрия)
- Биоинформатика (сравнение и анализ последовательностей генетических макромолекул, базы данных в области молекулярной биологии)

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо для освоения дисциплины
Современные проблемы биологии: биоинформатика структур макромолекул:

- Эволюционная биология II: эволюция сложных систем;
- Генетическая инженерия;
- Биотехнология

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 3 з.е. (108 ч)

Форма промежуточной аттестации: 3 семестр –экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
1	Лекции, ч	24
2	Практические занятия, ч	16
3	Лабораторные занятия, ч	
4	Занятия в контактной форме, ч., из них	44
5	из них аудиторных занятий, ч	30
6	в электронной форме, ч	10
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	64
10	Всего, ч	108

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

3 семестр Лекции (14 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Раздел 1 Статистические методы	
1. Математическая статистика	2
2. Методы анализа данных	2
3. Методы и алгоритмы анализа структуры многомерных данных	2
Раздел 2 Методы структурного анализа белков.	
1. Структура и функция белков.	2
2. Молекулярное моделирование структуры белков.	2
3. Алгоритмы и программы предсказания третичной структуры белка.	2
4. Белковые лингвистические модели.	2

5. Белок-белковые взаимодействия: особенности структуры белок-белковых комплексов. Эволюция белков в составе полных геномов.	2
6. Структурная организация активных сайтов белков.	2
7. Количественный анализ взаимосвязи структура-активность.	2
Раздел 3 Компьютерное конструирование лекарств	
1. Введение в проблему конструирования лекарственных препаратов	2
2. Компьютерные методы молекулярного дизайна биологически активных веществ.	2

Практические занятия (34 ч)

Содержание практического занятия	Объем, час
Решение задач по темам 1-3	14
Подготовка и сдаче курсового проекта	2

5. Перечень учебной литературы

5.1 Основная литература

1. Введение в информационную биологию и биоинформатику: учеб. пособие: в 5 т. / Отв. ред. Н.А. Колчанов, О.В. Вишневский, Д.П. Фурман; Новосиб. гос. ун-т.—Новосибирск: РИЦ НГУ, 2012.

5.2 Дополнительная литература

- Хаубольд, Бернхард. Введение в вычислительную биологию: эволюционный подход. Ижевск. 2011 г.
- Финкельштейн А.В., Птицин О.Б. Физика белка. – Москва, Книжный дом Университет, 2002.
- Шульц, Ширмер (1984) Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

- Курс «Специализация Биоинформатика» [Электронный ресурс]. - <https://ru.coursera.org/specializations/bioinformatics>
- Курс «Компьютерное моделирование в химии» [Электронный ресурс]. - <https://stepik.org/course/957/promo?search=1333296228>

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту.

7.1 Современные профессиональные базы данных:

- База биомедицинской научной литературы <http://pubmed.com/>

7.2. Информационные справочные системы

- Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

8.1 Перечень программного обеспечения

Windows и MS Office.

ОС Linux (Ubuntu 18.04), необходимо установить специализированное ПО (табл. 8.1).

Перечень специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины

№	Наименование ПО	Назначение
1	Google Chrome	Интернет браузер
2	Anaconda3	Среда разработки приложений
3	Adobe Acrobat Reader	Инструмент для работы с PDF-файлами
4	Notepad++	Программа для работы с текстовыми файлами
5	RStudio	Среда разработки программного обеспечения с открытым исходным кодом для языка программирования R

8.2 Информационные справочные системы

Не используются

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Реализация дисциплины осуществляется с применением электронного обучения на платформах coursera.org и stepik.org, где обучение проводится на виртуальных аналогах, позволяющим достигать запланированных результатов по дисциплине.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются следующие наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий:

- комплект лекций-презентаций по темам дисциплины.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень результатов обучения по дисциплине Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных и индикаторов их достижения представлен в виде знаний, умений и владений в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль успеваемости:

Промежуточная аттестация:

Текущий контроль по дисциплине «Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных» осуществляется на практических занятиях, а также в проверке выполненных и сданных преподавателю домашних заданий, на базе которых создается оценочное портфолио для каждого обучающегося. Домашние задания выполняются в письменной форме и сдаются преподавателю в электронной информационно-образовательной среде НГУ. В зависимости от количества баллов, полученных за портфолио, обучающемуся выставляется оценка «зачтено» или «не зачтено». Оценка «зачтено» является условием успешного прохождения 1 этапа промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных» проводится по завершению периода ее освоения (семестра). Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в два этапа:

- 1) Оценочное портфолио по результатам работы в семестре, которое включает: 1 домашнее задание из 4 задач и индивидуальный (или групповой) проект.
- 2) Представление и защиты отчета по результатам индивидуального (или группового) проекта, являющегося результатом самостоятельной работы студента (студентов) по теме, связанной с методами анализа метагеномных или метатранскриптомных данных, а также устный ответ на вопросы экзаменационного билета.

Результаты промежуточной аттестации по дисциплине оцениваются по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных

Таблица 10.1

Код компетенции	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
-----------------	----------------------------------	--------------------

ОК-1	Умение решать различные задачи (учебные или возникающие в процессе исследовательской работы) с использованием базовых знаний по дисциплине, способность делать выводы из имеющихся данных (теоретических, экспериментальных), позволяющие прийти к решению проблемы учебного или практического плана	Портфолио Курсовой проект Экзамен
	Владение навыками решения типовых задач по дисциплине; способность формулировать выводы из полученных обучающимся экспериментальных данных	Портфолио Экзамен
ОПК-3	Знание основных принципов анализа и теоретических основ базовых методов метагеномного анализа	Портфолио Экзамен
	Знание современных методов метагеномного анализа с использованием геномных прочтений	Экзамен
	Владение навыками самостоятельного анализа имеющейся информации	Курсовой проект Экзамен
ОПК-4	Знание программного обеспечения, необходимого для обработки экспериментальных результатов и оформления этих результатов в виде отчетов, статей и т. п.	Курсовой проект Экзамен
	Умение проводить анализ прочтений с помощью бесплатных программных ресурсов	Портфолио Курсовой проект
	Владение навыком корректного интерпретирования экспериментального материала	Портфолио Курсовой проект
ОПК-7	Знание методологии, конкретных методов и приемов научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий, необходимые для освоения дисциплин профессионального цикла	Курсовой проект Экзамен
	Знание современных методов статистической обработки биологических экспериментальных данных	Экзамен
	Владение современными компьютерными технологиями при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации	Портфолио Курсовой проект
ПК-1	Умение применять на практике базовые теоретические знания современной биологии, методологии современных биологических исследований; новейших достижений в области биологических исследований	Портфолио Курсовой проект
	Умение использовать теоретические знания и экспериментальные навыки для самостоятельного планирования и проведения эксперимента, анализа и оформления полученных результатов	Портфолио Курсовой проект
ПК-4	Знание основных теорий, концепций и принципов в избранной области деятельности	Курсовой проект Экзамен

	Владение приемами и методами для выполнения и решения новых идей	Портфолио
	Владение навыками составления творческих проектов	Курсовой проект
Пк-7	Знание основы проектирования и методы контроля биотехнологических процессов	Курсовой проект
	Умение формулировать проблему и предлагать пути ее решения с использованием биотехнологических методов и подходов	Курсовой проект
	Владение навыком самостоятельного осуществления проектирования биотехнологических процессов и поиска методов решения практических задач, применения различных методов познания	Курсовой проект

Таблица 10.2 р

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<u>Курсовой проект</u> – обоснованность теоретическим и фактическим материалом, подкрепленным ссылками на научную литературу и источники, – корректность и адекватность выбранных методов анализа и их интерпретации, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий, – полнота раскрытия темы. <u>Портфолио:</u> – точность ответа, отсутствие ошибок. <u>Экзамен:</u> – владение теоретическим и фактическим материалом, подкрепленным ссылками на научную литературу и источники, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, отсутствие затруднений при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. При изложении ответа на вопрос(ы) экзаменационного билета обучающийся мог допустить принципиальные неточности.	Отлично
<u>Курсовой проект</u> – обоснованность теоретическим и фактическим материалом, подкрепленным ссылками на научную литературу и источники, – неполнота реализации выбранных методов анализа и их интерпретации, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок,	Хорошо

– полнота раскрытия темы. <u>Портфолио</u> – не менее 80% ответов должны быть правильными. <u>Экзамен:</u> – обоснованность теоретическим и фактическим материалом, подкрепленным ссылками на научную литературу и источники, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в объяснении отдельных задач, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок.	
<u>Курсовой проект:</u> – теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплен ссылками на научную литературу и источники, – неосознанность и неосновательность выбранных методов анализа и их интерпретации, – частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей, – осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – фрагментарность раскрытия темы. <u>Портфолио</u> – не менее 50% ответов должны быть правильными. <u>Экзамен:</u> – теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплен ссылками на научную литературу и источники, – частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей, – самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, а также затруднений при формулировке собственных суждений, – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.	<i>Удовлетворительно</i>
<u>Курсовой проект :</u> – отсутствие теоретического и фактического материала, подкрепленного ссылками на научную литературу и источники, – отсутствие анализа и интерпретации выбранных методов, – непонимание причинно-следственных связей, – компилятивное, неосмысленное, нелогичное и неаргументированное изложение материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – фрагментарность раскрытия темы. – неподготовленность докладов и выступлений на основе предварительного изучения литературы по темам, неучастие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия.	<i>Неудовлетворительно</i>

Портфолио :

– присутствие многочисленных ошибок (более 70% ответов содержат ошибки).

Экзамен:

– фрагментарное и недостаточное представление теоретического и фактического материала, не подкрепленное ссылками на научную литературу и источники,

– непонимание причинно-следственных связей,

– отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала,

– грубые ошибки в применении терминов и понятий,

– отсутствие ответов на дополнительные вопросы.

**Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки
результатов обучения**

Перечень вопросов экзамена, структурированный по категориям

Формулировка вопроса
Вопрос 1. Предмет и основные задачи молекулярной эволюции. Объект исследования молекулярной эволюции. Математические модели единичных замен на примере ДНК (мутационные события, матрицы замен).
Вопрос 2. Классификация функциональных сайтов. Специфические особенности структурной организации активных центров ферментов, сайтов связывания лигандов, сайтов пост-трансляционной модификации. Антигенные детерминанты как класс сайтов белок-белковых взаимодействий; Конформационные и линейные эпитопы.
Вопрос 3. Модели эволюции белковых последовательностей. Влияние мутаций на структуру и функцию белков. Нейтральная теория Кимуры.
Вопрос 4. Методы распознавания сайтов связывания с использованием афинной селекции из комбинаторных библиотек пептидов; фаговый дисплей; Компьютерные методы распознавания функциональных сайтов: методы, основанные на анализе множественного выравнивания гомологичных белков; паттерны; весовые матрицы; нейронные сети; методы теории графов; методы структурного выравнивания.
Вопрос 5. Множественное выравнивание аминокислотных последовательностей. Методы и программы множественного выравнивания аминокислотных последовательностей. Базы данных множественного выравнивания аминокислотных последовательностей.
Вопрос 6. Методы анализа взаимосвязи структура-активность для малых молекулярных соединений QSAR, 3DQSAR, COMFA. Качественное и количественное описание активности. Структурные, геометрические, стерические и электронные параметры. Физико-химические характеристики. Топологические индексы.
Вопрос 7. Филогенетический анализ белковых последовательностей. Основные методы построения филогенетических деревьев. Особенности эволюции белков и методы их учета при построении математических моделей. Координированные замены остатков.
Вопрос 8. «Физические» модели в анализе связи «структура-активность». Метод Ханша. Соотношения линейности свободной энергии. Аддитивная модель Фри-Уильсона. Регрессионные методы в анализе связи «структура-активность». Методы анализа взаимосвязи структура-активность для белков.
Вопрос 9. Выравнивание белковых структур. Постановка задачи. Основные понятия о геометрических преобразованиях: сдвиг, поворот, центр масс, главные оси.
Вопрос 10. Методы сравнения белковых структур. Классификация белковых структур. Базы данных SCOP, FSSP, CATH.
Вопрос 11. Белковые лингвистические модели (Word2vec, embeddings, transformers & attentions). Предобученные белковые лингвистические модели (ProtTrans, Evolutionary Scale Modeling, RITA). Основные алгоритмы и область применения.
Вопрос 12. Методы предсказания вторичной структуры белка. Программы предсказания доступные через Интернет.
Вопрос 13. Методы предсказания пространственной структуры белка. Методы предсказания типа укладки белка. Программы предсказания доступные через Интернет.
Вопрос 14. Белки как участники генной сети. Белок-белковые взаимодействия.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

Лист актуализации рабочей программы дисциплины
«Методы биологического исследования: анализ метагеномных данных»

[illegible]