### МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

# федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования\_ «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Институ	ут информационных технологий, математики и механики
	УТВЕРЖДЕНО
	решением президиума Ученого совета ННГУ
	протокол № 1 от 16.01.2024 г
	Рабочая программа дисциплины
	Введение в биоинформатику
	Уровень высшего образования
	Бакалавриат
	Направление подготовки / специальность
	01.03.02 - Прикладная математика и информатика
	Направленность образовательной программы
_	кладная математика и информатика (общий профиль)
При	
При	
При	Форма обучения

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

### 1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.ДВ.04.05 Введение в биоинформатику относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые	Планируемые результат	ъ обучения по дисциплине	Наименование оценочного средства			
компетенции	(модулю), в соответ	гствии с индикатором				
(код, содержание	достижения компетенци	И				
компетенции)	Индикатор достижения	Результаты обучения	Для текущего	Для		
	компетенции	по дисциплине	контроля	промежуточной		
	(код, содержание		успеваемости	аттестации		
	индикатора)					
ПК-6: Способен	ПК-6.1: Знает методы	ПК-6.1:	Задачи			
изучать и	применения современных	Знает фундаментальные и	Собеседование	Зачёт:		
применять программное	программных комплексов,	теоретические основы,		Контрольные		
прогриммное обеспечение,	пакетов прикладных	необходимые для исследования		вопросы		
проводить	программ и	научных проблем по		•		
расчётные работы	автоматизированных	предметной области курса.				
и выполнять	систем					
обработку	для решения прикладных	ПК-6.2:				
результатов	задач при проведении	Умеет определять и				
исследований	исследований	профессионально				
	ПК-6.2: Умеет	1				
	самостоятельно проводить	реализовывать необходимые				
	расчётные работы,	для решения прикладных задач				
	выбирать и применять	нелинейной динамики				
	современные программные	вычислительные алгоритмы,				
	комплексы, пакеты	анализировать полученные				
	прикладных программ и	результаты.				
	автоматизированные					
	системы, обрабатывать и	ПК-6.3:				
	_	Владеет необходимыми				
	анализировать полученные	вычислительными методами				
	результаты	нелинейной динамики для				
	ПК-6.3: Имеет	решения задач и анализа				
	практический опыт	1				
	применения современного	полученных научных				
	программного обеспечения	результатов в области				
	для решения прикладных	биоинформатики.				
	задач					

### 3. Структура и содержание дисциплины

### 3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	2
Часов по учебному плану	72

в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	16
- KCP	1
самостоятельная работа	39
Промежуточная аттестация	0
	Зачёт

### 3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего		в том ч	исле	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабора торные работы), часы	Bcero	Самостоятельная работа обучающегося, часы
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
Биоинформатика: определение, цели и задачи.	12	2	2	4	8
Подходы и области применения биоинформатики. Биологические базы данных.	14	3	3	6	8
Общая характеристика живой клетки: типы биомолекул, основные компоненты, функции.	14	3	3	6	8
Компьютерные инструменты анализа биомолекул.	16	4	4	8	8
Молекулярная эволюция: вычислительные подходы	15	4	4	8	7
Промежуточная аттестация – зачет	0			0	
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	72	16	16	33	39

### Содержание разделов и тем дисциплины

Биоинформатика: определение, цели и задачи.

Подходы и области применения биоинформатики. Биологические базы данных.

Общая характеристика живой клетки: типы биомолекул, основные компоненты, функции.

Компьютерные инструменты анализа биомолекул. Молекулярная эволюция: вычислительные подходы

### 4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Введение в биоинформатику (Иванченко М.В., Юсипов И.И.)" (https://elearning.unn.ru/course/view.php?id=5412).

Иные учебно-методические материалы: Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многоядерных многопроцессорных систем. Учебное пособие – Нижний Новгород; Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2010. (47 экз)

Лаптева Т.В., Иванченко М.В. Математические модели генной регуляции: Учебнометодическое пособие. Нижний Новгород: Нижегородскй госуниверситет, 2017. 24 с. Рег. № 1646.17.06 http://www.unn.ru/books/met files/LI.pd

- 5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)
- 5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:
- 5.1.1 Типовые задания (оценочное средство Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-6:

#### Задание 1

Разработать приложение, выполняющее поиск обратно-комплементарной цепи ДНК.

Входные параметры приложения: цепь ДНК.

Выходные параметры приложения: цепь ДНК, обратно-комплементарная к данной.

### Задание 2

Разработать приложение, выполняющее поиск стартовых позиций паттерна в геноме.

Входные параметры приложения: цепь ДНК, паттерн.

Выходные параметры приложения: массив стартовых позиций паттерна в цепи ДНК.

#### Задание 3

Разработать приложение, выполняющее подсчет числа вхождений паттерна в геном.

Входные параметры приложения: цепь ДНК, паттерн.

Выходные параметры приложения: число вхождений паттерна в геном.

#### Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Выполнена основная часть задания, возможно с незначительными недочетами
не зачтено	Выполнено менее половины задания, есть существенные недочеты

### 5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Собеседование) для оценки сформированности компетенции ПК-6:

- 1. Биоинформатика, определение и задачи. Мультидисциплинарность, фундаментальные и прикладные аспекты.
- 2. Мишени новых лекарств: поиск и валидация.
- 3. Парное выравнивание последовательностей. Алгоритмы Смита-Уотермана и Нидлмана-Вунша (локальное и глобальное выравнивание). Матрицы замен.
- 4. Структурная организация белка, база данных PDB.
- 5. Теория распознавания образов, применение в биоинформатике. Обучение с учителем.
- 6. Множественное выравнивание последовательностей. Матрицы замен.
- 7. Предсказание вторичной структуры РНК и ДНК.
- 8. Анализ филогений нуклеотидных и аминокислотных последовательностей, методы построения филогенетических деревьев. Понятия SNP и SAP.
- 9. Алгоритм BLAST. Модификации и области применения.
- 10. Первичная аннотация геномов. Поиск кодирующих фрагментов.
- 11. Предсказание пространственной структуры белка.
- 12. Методы сравнительной геномики, предсказание функций и регуляции генов.
- 13. Молекулярный докинг. Принципы и области применения.
- 14. Протеомные технологии. Принципы, области применения возможности и перспективы.
- 15. Понятие марковского процесса. Марковская цепь. Применение в биоинформатике.
- 16. Построение пространственных моделей белков и низкомолекулярных соединений.
- 17. Масс-спектрометрия. Принципы работы, типы масс-спектрометров. Идентификация пептидов и белков.
- 18. Динамическое программирование. Применение в задачах выравнивания последовательностей.
- 19. Структурно-функциональные мотивы как молекулярная основа сходства и различия белков
- 20. Базы данных нуклеотидных и аминокислотных последовательностей. Форматы представления данных.
- 22. Проект "Геном человека".
- 23. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры белка-мишени.

- 24. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов. База данных PubChem.
- 27. Белок-белковые взаимодействия, способы регистрации.
- 28. Регуляция экспрессии генов в прокариотах и эукариотов.

### Критерии оценивания (оценочное средство - Собеседование)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Студент дал развернутый ответ на все вопросы без существенных ошибок.
не зачтено	При ответе студент допускает грубые ошибки в основном материале.

### 5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

### Шкала оценивания сформированности компетенций

	1	minasia onemi		1 1	ı	'		
Уровен ь сформи рованн ости компет	плохо	неудовлетвор ительно	удовлетво рительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно	
енций (индик атора достиж ения компет енций)	не зач	тено	зачтено					
Знания	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимальн о допустимы й уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответству ющем программе подготовки . Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответству ющем программе подготовки . Допущено несколько несуществе нных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответств ующем программе подготовк и. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающе м программу подготовки.	
Умения	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрир ованы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продемонс трированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонс трированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонс трированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонс трированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельным и несуществ енными недочетам и, выполнены все задания в	Продемонстр ированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов	

Навыки	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие	При решении стандартных задач не продемонстрир ованы базовые навыки. Имели	Имеется минимальн ый набор навыков для решения стандартны	Продемонс трированы базовые навыки при решении стандартны х задач с	Продемонс трированы базовые навыки при решении стандартны	полном объеме Продемонс трированы навыки при решении нестандарт ных задач	Продемонстр ирован творческий подход к решению
	отказа обучающегося от ответа	место грубые ошибки	х задач с некоторым и недочетами	некоторым и недочетами	х задач без ошибок и недочетов	без ошибок и недочетов	нестандартны х задач

### Шкала оценивания при промежуточной аттестации

0	ценка	Уровень подготовки				
	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой				
	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».					
зачтено	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»				
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».				
	удовлетворитель но	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»				
не зачтено	неудовлетворите льно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».				
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»				

## 5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

### 5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции $\Pi K$ -6

- 1. Дайте определение биоинформатики. Цели и задачи биоинформатики. Приведите пример подходов и областей применения.
- 2. Какова общая характеристика живой клетки. Какие типы биомолекул присутствуют в клетке. Перечислите основные компоненты клетки.
- 3. Опишите строение белков и основные свойства белков.

- 4. Какие компьютерные инструменты анализа свойств белков Вы знаете.
- 5. Перечислите форматы записи первичной структуры белков.
- 6. Приведите примеры баз данных белков.
- 7. Перечислите основы структур баз данных (записи, поля, объекты), классификации баз по способу заполнения (автоматические, архивные, курируемые). Дайте характеристику основных баз данных: GenBank, EMBL, SwissProt, TrEMBL, PIR, PDB.
- 8. Приведите пример баз данных, содержащие результаты глобальных экспериментов по анализу экспрессии, протеомике, и т.п.
- 9. Какие программы расчета физико-химических свойств белков Вы знаете.
- 10. Домены: строение и свойства.
- 11. Перечислите основные требования к банкам данных белковых семейств (SCOP, Prosite, ProDom, PFAM, InterPro).
- 12. Пространственная структура белков методы и программные средства для анализа.
- 13. Методы получения трехмерных структур белков.
- 14. Инструменты визуализации 3D структур белков.
- 15. Дайте основные характеристики базы данных 3D структур белков PDB.
- 16. Перечислите основные функции белков.
- 17. Как происходит аннотирование функций в базах данных.
- 18. База данных GO (Gene Ontology).
- 19. Сравнение последовательностей.
- 20. Выравнивание двух последовательностей.
- 21. Глобальное и локальное выравнивание, вес выравнивания, матрицы аминокислотных замен.
- 22. Дот-матрицы.
- 23. Глобальное выравнивание: алгоритм Нидельмана-Вунша.
- 24. Локальное выравнивание: алгоритм Смита-Ватермана.
- 25. Другие алгоритмы локального выравнивания.
- 26. Статистическая значимость выравниваний и ее зависимость от вероятностной модели последовательности (в т.ч. сегменты малой сложности)

- 28. Множественное выравнивание. 29. Динамическое программирование. 30. Последовательное выравнивание (Clustal). 31. Поиск по сходству в базах данных. 32. Алгоритм Smith-Waterman. 33. Алгоритм BLAST. 34. Алгоритм FASTA. 35. Статистическая оценка значимости (E-value, P-value). 36. Марковские модели (HMM, Hidden Markov models). 37. Позиция-специфичные матрицы расчета (Position-specific scoring matrices, PSSM). Паттерны, Sequence logos, Psi-BLAST. 38. Анализ структурных особенностей белков. 39. Моделирование белков. 40. Предсказание структур белков разных уровней организации. 41. Программное обеспечение для компьютерного анализа структур белков.

Белок-белковые взаимодействия.

Зависимость выравнивания от параметров.

27.

42.

- 43. Базы данных белок-белковых взаимодействий (IntAct, BIND).
- 44. Программы анализа белковых комплексов.
- 45. Компьютерный расчет областей белок-белкового контакта.
- 46. Компьютерный расчет поверхности белка, доступной для растворителя.
- 47. Нуклеиновые кислоты. Строение и свойства. Структура ДНК.
- 48. Генетический код и его свойства.
- 49. Базы данных нуклеотидных последовательностей (TrEMBL, EMBL).
- 50. Репликация ДНК и биосинтез белка.
- 51. Компьютерное предсказание белков на основе данных о нуклеотидной последовательности.

- 52. РНК. Транскриптомика.
- 53. Молекулярная эволюция.
- 54. Эволюция молекул и организмов.
- 55. Ортологи и паралоги.
- 56. Горизонтальный перенос.
- 57. Предсказание структур белков разных уровней организации.
- 58. Программное обеспечение для компьютерного анализа структур белков.
- 59. Белок-белковые взаимодействия.
- 60. Базы данных белок-белковых взаимодействий (IntAct, BIND).
- 61. Программы анализа белковых комплексов.
- 62. Компьютерный расчет областей белок-белкового контакта.
- 63. Компьютерный расчет поверхности белка, доступной для растворителя.
- 64. Нуклеиновые кислоты. Строение и свойства. Структура ДНК.
- 65. Генетический код и его свойства.
- 66. Базы данных нуклеотидных последовательностей (TrEMBL, EMBL).
- 67. Репликация ДНК и биосинтез белка.
- 68. Компьютерное предсказание белков на основе данных о нуклеотидной последовательности.

### Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Студент ответил на большую часть вопросов возможно с незначительными недочетами.
не зачтено	При ответе студент допускает грубые ошибки в основном материале и решении стандартных задач.

### 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Лаптева Т. В. Математические модели генной регуляции : учебно-методическое пособие /

Лаптева Т. В., Иванченко М. В. - Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2017. - 24 с. - Рекомендовано методической комиссией института информационных технологий, математики и механики для студентов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 01.03.02 и 01.04.02 "Прикладная математика и информатика". - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ННГУ им. Н. И. Лобачевского - Математика., https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=730016&idb=0.

2. Асанов М. О. Дискретная математика: графы, матроиды, алгоритмы: учебное пособие / Асанов М. О., Баранский В. А., Расин В. В. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2020. - 364 с. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции Лань - Математика. - ISBN 978-5-8114-4998-9., https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry? Action=FindDocs&ids=707849&idb=0.

### Дополнительная литература:

1. Гергель Виктор Павлович. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем: учеб. для студентов вузов, обучающихся по направлениям ВПО 010400 "Прикладная математика и информатика" и 010300 "Фундам. информатика и информ. технологии" / Б-ка ННГУ. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 2010. - 544 с.: ил. - (Суперкомпьютерное образование). - На обл. кн.: Суперкомпьютерный консорциум университетов России. - ISBN 978-5-211-05937-5: 220.00., 49 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

- 1. Kypc «Алгоритмы биоинформатики» Н.И.Вяххи: https://www.lektorium.tv/course/22933
- 2. http://www.fbb.msu.ru/ факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ
- 3. http://bioinf.spbau.ru/about лаборатория Алгоритмической биологии, Санкт-Петербургский академический университет РАН.
- 4. http://www.bionet.nsc.ru/kib/?page id=28 кафедра информационной биологии, НГУ
- 5. http://biodynamics.ucsd.edu/ лаборатория Биодинамики Университета Калифорнии в Сан Диего.
- 6. http://bioinformatics.ru/ российский портал по биоинформатике
- 7. Библиотека масс-спектров для идентификации белков, алгоритм X!Tandem (The GPM) http://www.thegpm.org/TANDEM/instructions.html (в свободном доступе)
- 8. Программа DAVID (The Database for Annotation, Visualization and Integrated Discovery) (в свободном доступе)
- 9. Платформа Cytoscape (в свободном доступе)

### 7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами.

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

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению подготовки 01.03.02 - Прикладная математика и информатика.

Автор(ы): Иванченко Михаил Васильевич, доктор физико-математических наук, доцент.

Рецензент(ы): д.т.н., профессор НГТУ им. Р.Е. Алексеева Ломакина Л.С.

Заведующий кафедрой: Иванченко Михаил Васильевич, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 13.12.2023, протокол № 3.