

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Институт информационных технологий, математики и механики
(факультет / институт / филиал)

УТВЕРЖДЕНО
президиумом Ученого совета ННГУ
протокол от
«14» декабря 2021 г. № 4

Рабочая программа дисциплины

Введение в биоинформатику

(наименование дисциплины (модуля))

Уровень высшего образования

бакалавриат

(бакалавриат / магистратура / специалитет)

Направление подготовки / специальность

01.03.02 Прикладная математика и информатика

(указывается код и наименование направления подготовки / специальности)

Направленность образовательной программы

Прикладная математика и информатика (общий профиль)

(указывается профиль / магистерская программа / специализация)

Форма обучения

очная

(очная / очно-заочная / заочная)

Нижний Новгород

2022 год

1. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

Код дисциплины Б1.В.ДВ.04.05.

№ варианта	Место дисциплины в учебном плане образовательной программы	Стандартный текст для автоматического заполнения в конструкторе РПД
2	Блок 1. Дисциплины (модули) Часть, формируемая участниками образовательных отношений	Дисциплина Б1.В.ДВ.04.05, «Введение в биоинформатику» относится к части ООП направления подготовки 01.03.02 «Прикладная математика и информатика», формируемой участниками образовательных отношений.

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

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции* (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине**	
ПК-4. Способен применять методы математического и компьютерного исследования при анализе задач на основе знаний фундаментальных математических и компьютерных наук	ПК-4.1. Знает фундаментальные и теоретические основы, необходимые для исследования научных проблем	Знает фундаментальные и теоретические основы, необходимые для исследования научных проблем по предметной области курса.	Собеседование
	ПК-4.2. Умеет самостоятельно применять полученные знания для анализа объекта исследования, определять цели и задачи исследования, а также выбирать корректный метод исследования научной проблем	Умеет определять и профессионально реализовывать необходимые для решения прикладных задач нелинейной динамики вычислительные алгоритмы, анализировать полученные результаты.	Собеседование Практические задания
	ПК-4.3. Имеет практический опыт	Владеет необходимыми вычислительными методами нелинейной	Практические задания

	научно-исследовательской деятельности, а именно решения научных задач в соответствии с поставленной целью и выбранной методикой	динамики для решения задач и анализа полученных научных результатов в области биоинформатики.	
--	---	---	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1. Трудоемкость дисциплины

	Очная форма обучения
Общая трудоемкость	2 ЗЕТ
Часов по учебному плану	72
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	33
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа	16
- текущий контроль (КСР)	1
самостоятельная работа	39
Промежуточная аттестация –зачет	

3.2. Содержание дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы. Из них				
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего	
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
Текущий контроль (КСР)	1				1	
Промежуточная аттестация – зачет						
Итого	72	16	16		33	39

Текущий контроль успеваемости реализуется в форме опросов на занятиях семинарского типа.

Промежуточная аттестация проходит в традиционной форме (зачет).

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

а. Виды самостоятельной работы студентов

- проработка теоретического материала лекционных занятий;
- подготовка к практическим занятиям;
- подготовка к промежуточной аттестации.

Проработка теоретического материала лекционных занятий

Выполняется самостоятельно обучающимся с использованием материалов лекций и рекомендованной основной и дополнительной литературы. Контроль проводится в часы контроля самостоятельной работы студентов.

Подготовка к практическим занятиям

Выполняется самостоятельно обучающимся с использованием лекционных материалов. Контроль выполняется на практических занятиях.

Подготовка к промежуточной аттестации

Фактором успешного прохождения промежуточной аттестации является систематическая работа студента в течение всего периода изучения дисциплины. В этом случае подготовка к зачету будет концентрированной систематизацией всех полученных знаний, умений и навыков.

В качестве методических материалов при подготовке к зачету рекомендуется использовать собственные конспекты лекций и рекомендованную основную и дополнительную литературу.

б. Образовательные материалы для самостоятельной работы студентов

1. Курс «Алгоритмы биоинформатики» Н.И.Вяххи: <https://www.lektorium.tv/course/22933>
2. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многоядерных многопроцессорных систем. Учебное пособие – Нижний Новгород; Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2010. (47 экз)
3. Лаптева Т.В., Иванченко М.В. Математические модели генной регуляции: Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. 24 с. Рег. № 1646.17.06 http://www.unn.ru/books/met_files/LI.pdf

Контрольные вопросы и задания для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведены в п. 5.2.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий:

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения)	Шкала оценивания сформированности компетенций					
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично
	Не зачтено		Зачтено			

компетенций)							
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала.	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
	Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами.	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.

Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	Превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
	Отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
	Очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»

	Хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
	Удовлетворительно	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	Неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
	Плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

Критерии оценок за выполнение практического задания

(каждое задание оценивается в 1 балл)

Практическое задание выполнено в полном объеме, отчет правильно и аккуратно оформлен	1	Превосходно	Зачтено
		Отлично	
Практическое задание выполнено в полном объеме, но отчет не аккуратно оформлен	0,75	Очень хорошо	
		Хорошо	
Практическое задание выполнено в полном объеме, но не достаточно самостоятельно, отчет оформлен	0,5	Удовлетворительно	Не зачтено
Практическое задание не выполнено	0	Неудовлетворительно	

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

5.2.1 Контрольные вопросы

вопросы	Код формируемой компетенции
1. Дайте определение биоинформатики. Цели и задачи биоинформатики. Приведите пример подходов и областей применения.	ПК-4
2. Какова общая характеристика живой клетки. Какие типы биомолекул присутствуют в клетке. Перечислите основные компоненты клетки.	ПК-4
3. Опишите строение белков и основные свойства белков.	ПК-4
4. Какие компьютерные инструменты анализа свойств белков Вы знаете.	ПК-4
5. Перечислите форматы записи первичной структуры белков.	ПК-4
6. Приведите примеры баз данных белков.	ПК-4
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.	ПК-4
8. Приведите пример баз данных, содержащие результаты	ПК-4

глобальных экспериментов по анализу экспрессии, протеомике, и т.п.	
9. Какие программы расчета физико-химических свойств белков Вы знаете.	ПК-4
10. Домены: строение и свойства.	ПК-4
11. Перечислите основные требования к банкам данных белковых семейств (SCOP, Prosite, ProDom, PFAM, InterPro).	ПК-4
12. Пространственная структура белков – методы и программные средства для анализа.	ПК-4
13. Методы получения трехмерных структур белков.	ПК-4
14. Инструменты визуализации 3D структур белков.	ПК-4
15. Дайте основные характеристики базы данных 3D структур белков PDB.	ПК-4
16. Перечислите основные функции белков.	ПК-4
17. Как происходит аннотирование функций в базах данных.	ПК-4
18. База данных GO (Gene Ontology).	ПК-4
19. Сравнение последовательностей.	ПК-4
20. Выравнивание двух последовательностей.	ПК-4
21. Глобальное и локальное выравнивание, вес выравнивания, матрицы аминокислотных замен.	ПК-4
22. Дот-матрицы.	ПК-4
23. Глобальное выравнивание: алгоритм Нидельмана-Вунша.	ПК-4
24. Локальное выравнивание: алгоритм Смита-Ватермана.	ПК-4
25. Другие алгоритмы локального выравнивания.	ПК-4
26. Статистическая значимость выравниваний и ее зависимость от вероятностной модели последовательности (в т.ч. сегменты малой сложности)	ПК-4
27. Зависимость выравнивания от параметров.	ПК-4
28. Множественное выравнивание.	ПК-4
29. Динамическое программирование.	ПК-4
30. Последовательное выравнивание (Clustal).	ПК-4
31. Поиск по сходству в базах данных.	ПК-4

32. Алгоритм Smith-Waterman.	ПК-4
33. Алгоритм BLAST.	ПК-4
34. Алгоритм FASTA.	ПК-4
35. Статистическая оценка значимости (E-value, P-value).	ПК-4
36. Марковские модели (HMM, <u>H</u> idden <u>M</u> arkov <u>m</u> odels).	ПК-4
37. Позиция-специфичные матрицы расчета (Position-specific scoring matrices, PSSM). Паттерны, Sequence logos, Psi-BLAST.	ПК-4
38. Анализ структурных особенностей белков.	ПК-4
39. Моделирование белков.	ПК-4
40. Предсказание структур белков разных уровней организации.	ПК-4
41. Программное обеспечение для компьютерного анализа структур белков.	ПК-4
42. Белок-белковые взаимодействия.	ПК-4
43. Базы данных белок-белковых взаимодействий (IntAct, BIND).	ПК-4
44. Программы анализа белковых комплексов.	ПК-4
45. Компьютерный расчет областей белок-белкового контакта.	ПК-4
46. Компьютерный расчет поверхности белка, доступной для растворителя.	ПК-4
47. Нуклеиновые кислоты. Строение и свойства. Структура ДНК.	ПК-4
48. Генетический код и его свойства.	ПК-4
49. Базы данных нуклеотидных последовательностей (TrEMBL, EMBL).	ПК-4
50. Репликация ДНК и биосинтез белка.	ПК-4
51. Компьютерное предсказание белков на основе данных о нуклеотидной последовательности.	ПК-4
52. РНК. Транскриптомика.	ПК-4
53. Молекулярная эволюция.	ПК-4
54. Эволюция молекул и организмов.	ПК-4
55. Ортологи и паралоги.	ПК-4
56. Горизонтальный перенос.	ПК-4
57. Предсказание структур белков разных уровней организации.	ПК-4

58. Программное обеспечение для компьютерного анализа структур белков.	ПК-4
59. Белок-белковые взаимодействия.	ПК-4
60. Базы данных белок-белковых взаимодействий (IntAct, BIND).	ПК-4
61. Программы анализа белковых комплексов.	ПК-4
62. Компьютерный расчет областей белок-белкового контакта.	ПК-4
63. Компьютерный расчет поверхности белка, доступной для растворителя.	ПК-4
64. Нуклеиновые кислоты. Строение и свойства. Структура ДНК.	ПК-4
65. Генетический код и его свойства.	ПК-4
66. Базы данных нуклеотидных последовательностей (TrEMBL, EMBL).	ПК-4
67. Репликация ДНК и биосинтез белка.	ПК-4
68. Компьютерное предсказание белков на основе данных о нуклеотидной последовательности.	ПК-4

5.2.2. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-4

Перечень тем практических заданий для оценивания результатов обучения в виде умений и владений

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.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Лаптева Т.В., Иванченко М.В. Математические модели генной регуляции: Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. 24 с. Рег. № 1646.17.06 http://www.unn.ru/books/met_files/LI.pdf
2. Порозов, Ю.Б. Биоинформатика [Электронный ресурс] : учеб.-метод. пособие — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2012. — 52 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/43567>
3. Асанов, М.О. Дискретная математика: графы, матроиды, алгоритмы. [Электронный ресурс] / М.О. Асанов, В.А. Баранский, В.В. Расин. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2010. — 368 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/536?category_pk=914#authors

б) дополнительная литература:

1. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многоядерных многопроцессорных систем. М., 2010. (47 экз)

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. Курс «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

Помещения представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения.

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

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ 01.03.02 Прикладная математика и информатика.

Автор: д.ф.-м.н., зав. кафедрой ПМ Иванченко М.В.

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

Зав. каф. прикладной математики: д.ф.-м.н. Иванченко М.В.

Программа одобрена на заседании методической комиссии института информационных технологий, математики и механики

от 1 декабря 2021 года, протокол № 2.