
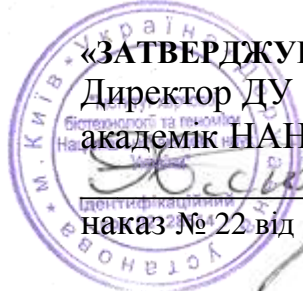


НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Державна установа
«ІНСТИТУТ ХАРЧОВОЇ БІОТЕХНОЛОГІЇ ТА ГЕНОМІКИ
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ»

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Директор ДУ «ІХБГ НАН України»
академік НАН України
 Ярослав БЛЮМ
наказ № 22 від 29 травня 2024 р.



РОБОЧА ПРОГРАМА
НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СТРУКТУРНА БІОІНФОРМАТИКА

для здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії
галузь знань 09 «Біологія»

спеціальність 091 «Біологія та біохімія»

Шифр за ОНП – ВК 2.1.

Робоча програма навчальної дисципліни «**Структурна біоінформатика**» для здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії *галузі знань* 09 Біологія за *спеціальністю* 091 Біологія та біохімія.
«29» травня 2024 року – 29 с.

Розробник:

Карпов П.А., д.б.н., с.н.с.

Робоча програма дисципліни «**Структурна біоінформатика**» схвалена на засіданні вченої ради ДУ «ІХБГ НАН України» (протокол № 7 від «29» травня 2024 року).

Робоча програма дисципліни «**Структурна біоінформатика**» розглянута на засіданні випускового відділу геноміки та молекулярної біотехнології ДУ «ІХБГ НАН України».

Завідувач відділу академік НАН України

Ярослав БЛЮМ

27 травня 2024 року

ВСТУП

Навчальна дисципліна «**Структурна біоінформатика**» є складовою освітньо-наукової програми підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії *галузі знань* 09 Біологія за *спеціальністю* 091 Біологія та біохімія.

Дана дисципліна є дисципліною за вибором аспіранта за *спеціальністю* 091 Біологія та біохімія.

Викладається у 3 семестрі II року навчання аспірантури **в обсязі – 120 год. (4 кредити ECTS)** зокрема: *лекції – 20 год, практичні роботи – 20 год, самостійна робота – 80 год.* У курсі передбачено 3 *змістових модулі*. Завершується дисципліна заліком.

Мета і завдання навчальної дисципліни «Структурна біоінформатика» – ознайомити здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії галузі знань 09 Біологія на сучасному професійному рівні з сучасною екосистемою спеціалізованих баз даних, web-ресурсами, методами та програмними засобами біоінформатики та структурної біології, а також з її фундаментальними та прикладними аспектами у зв'язку із дослідженнями у галузі цитології, клітинної біології, гістології, молекулярної генетики, біотехнології, тощо.

Завдання дисципліни:

1) сформувати у здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії уявлення стосовно задач, методів, інструментів і протоколів структурної біоінформатики, що наряду з методами лабораторного дослідження використовуються під час дослідження структурно-функціональних аспектів молекулярних процесів клітини;

2) ознайомити здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії з існуючими спеціалізованими web-ресурсами, базами молекулярних, геномних і протеомних даних, та надати базові навички пошуку, депонування і аналізу структурно-біологічної інформації із використанням сучасних структурно-біоінформатичних методів *in silico*;

3) сформувати у здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії уявлення про експериментальні, біологічні, хімічні, математичні та біофізичні основи ключових методів і алгоритмів біоінформатики та структурної біології;

4) сформувати у здобувачів уявлення про основні методи біоінформатики та структурної біології як цільної системи: від первинних результатів секвенування нуклеотидних послідовностей до моделювання молекулярних структур, їх динаміки і різноманітних міжмолекулярних взаємодій.

1.1. В результаті вивчення навчальної дисципліни у здобувачів мають бути сформовані:

Інтегральна компетентність (ІК): Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі біології у процесі проведення дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та професійної практики, оволодіння методологією наукової та науково-педагогічної діяльності, проведення самостійного наукового дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення і інтегруються у світовий науковий простір через публікації.

Загальні компетентності (ЗК):

- ЗК01.** Знати та розуміти предметну область та розуміти професійну діяльність.
- ЗК02.** Бути здатним працювати в міжнародному контексті.
- ЗК03.** Бути здатним розробляти та управляти проектами.
- ЗК04.** Бути здатним мотивувати людей та рухатися вперед.
- ЗК05.** Бути здатним оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
- ЗК06.** Бути здатним працювати автономно та в команді.

Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК):

- СК01.** Здатність аналізувати явища та процеси з точки зору фундаментальних загальнонаукових принципів і знань, адекватно застосовувати концептуальні та методологічні знання в галузі біології.
- СК02.** Здатність виявляти, формулювати та вирішувати проблеми дослідницького характеру в галузі біології, оцінювати та забезпечувати якість досліджень, зокрема, і міждисциплінарних.
- СК03.** Здатність критично аналізувати, оцінювати і синтезувати нові ідеї.
- СК04.** Здатність ініціювати, планувати і здійснювати комплексні оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які мають бути оприлюднені у наукових виданнях.
- СК05.** Здатність обирати методи та критерії оцінки досліджуваних феноменів та процесів в галузі біології відповідно до цілей та завдань наукового дослідження.
- СК06.** Здатність застосовувати сучасні інформаційні технології, бази даних, електронні ресурси, спеціалізоване програмне забезпечення у науковій та навчальній діяльності.
- СК07.** Здатність ініціювати, розробляти, реалізовувати комплексні інноваційні проекти.
- СК08.** Здатність оприлюднювати результатів наукових досліджень в усній і письмовій формах відповідно до національних та міжнародних стандартів у академічній спільноті та суспільстві.
- СК09.** Здатність дотримуватись етичних принципів, академічної доброчесності та авторського права в наукових дослідженнях та науково-педагогічній діяльності.
- СК10.** Здатність сформувати системний науковий світогляд та загальнокультурний кругозір, навчатись упродовж життя.
- СК11.** Здатність використовувати закономірності та сучасні досягнення молекулярної генетики, клітинної біології, біотехнології у поєднанні з сучасним інструментарієм для дослідження біологічних систем та процесів.

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен:

PH01. Мати концептуальні та методологічні знання з біології і на межі предметних галузей, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій (*розрізняти первинні експериментальні джерела біоінформатичної і структурно-біологічної інформації, формати і особливості даних, що депоновані в репозиторіях спеціалізованих ресурсів; відрізняти і розуміти основні типи форматів зберігання та оперування молекулярно-біологічною інформацією, вміти користуватися архівними, керованими та похідними базами даних, розуміти основи депонування, керування та отримання молекулярно-біологічної інформації з основних спеціалізованих ресурсів*).

PH02. Вільно презентувати та обговорювати результати досліджень, наукові та прикладні проблеми біології державною та іноземною мовами, кваліфіковано відображати результати досліджень у наукових публікаціях у наукових виданнях. (*Вміти визначати ключову інформацію з масиву даних і представляти її у форматі, оптимальному для максимально зрозумілої і лаконічної репрезентації підсумкових висновків досліджень. А саме, у тренді провідних світових видавництв та наукових журналів.*)

PH03. Формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати аналізу джерел літератури, експериментальних досліджень (опитувань, спостережень, експерименту) і математичного та/або комп'ютерного моделювання (*самостійно працювати з базами наукової літератури і інформації, визначати ключові критерії пошуку, розуміти будову і взаємозв'язок між депонованими публікаціями і статтями спеціалізованих баз даних що містять молекулярно- і структурно-біологічну інформацію що пов'язана або доповнює дані літератури*).

PH04. Розробляти та досліджувати концептуальні, математичні і комп'ютерні моделі процесів і систем, ефективно використовувати їх для отримання нових знань та/або створення інноваційних продуктів у біології та дотичних міждисциплінарних напрямках (*розрізняти принципи та алгоритми молекулярного моделювання і опанувати мережеві і локальні інструменти для реконструкції і верифікації структури макромолекул, лігандів і мультимолекулярних комплексів*).

PH05. Планувати і виконувати експериментальні та/або теоретичні дослідження з біології та дотичних міждисциплінарних напрямів з використанням сучасного інструментарію, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті всього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми (*мати розуміння і вміти самостійно планувати методологічний алгоритм біоінформатичних, хемоінформатичних і структурно-біологічних досліджень, а також, вміти органічно комбінувати біоінформатичну і лабораторну складові наукового дослідження*).

PH06. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, методи статистичного аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи (*вміти аналізувати доменну архітектуру білків, складати патерни, мотиви і логи, вміти виконувати підготовку структур білків і лігандів до дослідження в залежності від вимог програм і сервісів, відповідно до задач власних досліджень,*

розуміти основні принципи методів віртуального скринінгу, розуміти принципи різних методів скринінгу, вміти визначати ключові взаємодії молекул за допомогою біоінформатичних інструментів, вміти будувати фармакофорні моделі і виконувати фармакофорний пошук, вміти виконувати молекулярний докінг і аналізувати результати, опанувати методи оптимізації структур за допомогою молекулярної механіки і динаміки, чітко розуміти переваги і обмеження методів структурної біоінформатики).

PH08. Глибоко розуміти загальні принципи та методи біологічних наук, а також методологію наукових досліджень, застосувати їх у власних дослідженнях у сфері біології та у викладацькій практиці (*пояснювати і мати розуміння стосовно ключових проблем та обмежень сучасних методів і програмних інструментів біоінформатичного і структурно-біологічного досліджень в залежності від поставленої наукової задачі, розуміти актуальну екосистему організації, обробки і зберігання молекулярно-біологічної інформації, розуміти доступні аналітичні можливості сервісів і програм, а також розуміти обмеження методів in silico і чітко розуміти точки взаємодії біоінформатичних і лабораторних методів, що надають можливість оптимізації досліджень*).

Місце дисципліни.

Навчальна дисципліна «**Структурна біоінформатика**» є навчальною дисципліною за вибором аспіранта програми підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії галузі знань 09 Біологія за спеціальністю 091 Біологія та біохімія.

Навчальна дисципліна «**Структурна біоінформатика**» вивчає загальні закономірності депонування, організації і аналізу інформації стосовно структури, ролі і особливостей функціонування біополімерів клітини, надає знання і навички роботи з ключовими базами даних, web-ресурсами, спеціалізованими програмами, а також вільного оперування сучасними методами біоінформатики та структурної біології у сучасних наукових дослідженнях.

Зв'язок з іншими дисциплінами.

Основою для вивчення навчальної дисципліни «**Структурна біоінформатика**» є обов'язкові для дисципліни «**Методологія наукових досліджень**», «**Геномна інженерія та синтетична біологія**», «**Структурна та функціональна геноміка**», «**Архітектура цито- та нуклеоскелету та морфогенез клітин**».

Навчальна дисципліна «**Структурна біоінформатика**» є вибірковою дисципліною для засвоєння знань та вмінь у системі професійної підготовки третього (освітньо-наукового) рівня з підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії за спеціальністю 091 Біологія та біохімія.

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1

Молекулярно-біологічна та інформаційна основа структурної біоінформатики

Тема 1. Ключові поняття, цілі і завдання сучасної біоінформатики та структурної біології. Алгоритми досліджень *in silico*. Бази даних наукової літератури та їх

сервіси. Картування геному. Статистичні методи прогнозу екзонів та інтронів. Депонування і сучасна екосистема молекулярно-біологічної інформації. (8 год)

Класична і структурна біоінформатика. Цілі і завдання структурної біоінформатики. Поняття геноміки та протеоміки. Історія створення, спеціалізація, формати статей баз даних і інструменти. Предмет та мета структурної біоінформатики. Хронологія ключових досліджень та відкриттів. Поняття: геному, протеому, біоінформатики, молекулярної біології. Основна догма молекулярної біології. Основи пошуку та зберігання біологічної інформації. PubMed. GenBank. Swiss-Prot. EMBL. TREMBL. UniProt: Swiss-Prot & TREMBL. PubMed-Entrez. Fasta та RAW. GenBank & EMBL. Ключові формати.

Організація генів прокариот і еукаріот. Поняття екзону та інтрону. Особливості контексту інтронів. Різниця визначень та змісту понять рамки зчитування та відкриті рамки зчитування (ORF). Статистичні та контекстні методи біоінформатичного прогнозування екзонів та інтронів. Інструменти пошуку і розшифровки генів. GENMARK. ORF Finder. GenDoc. Штатні інструменти NCBI.

Тема 2. Визначення консервативних мотивів і доменів як основа первинної функціональної анотації макромолекул. Математична складова вірогідності біоінформатичного прогнозу. Основи алгоритмів і роботи пошукових інструментів родини BLAST (nucleotide blast, protein blast, blastx, tblastn, tblastx psi-blast) особливості оцінки, аналізу і презентації результатів пошуку (12 год)

Засоби та методи порівняння біологічних послідовностей та просторових структур. Вагові матриці і їх застосування. Методи, алгоритми та програмне забезпечення. Локальні та глобальні, парні та множинні вирівнювання. Поняття гомології, консервативності, подібності та ідентичності. Методи визначення подібності та її математична складова. Мотиви. Патерни. Використання універсальних символів IUPAC. Механізми роботи пошукових систем, та алгоритмів. Родина алгоритмів BLAST: nucleotide blast, protein blast, blastx, tblastn, tblastx psi-blast. Основи роботи з мережевими сервісами BLAST на ресурсах NCBI, ExPasy і RCSB Protein Data Bank. Критерії оцінювання результатів біоінформатичного пошуку за гомологією послідовностей. Взаємодія сервісів BLAST з іншими мережевими інструментами. Основи роботи з програмами Clustal, t-coffe і FASTA. Алгоритми визначення доменів та профілів. Біоінформатичне визначення доменного складу і доменної архітектури in silico. Он-лайн інструменти прогнозування доменів і функціонально-важливих ділянок білку: SMART, Pfam, PROSITE, тощо. Використання профілів і прихованих моделей Маркова (HMM).

Тема 3. Методи, алгоритми і задачі молекулярної філогенетики. Галузі застосування. Біоінформатична реконструкція, візуалізація та аналіз дендрограмм. Математична і програмна складові кладистичного аналізу. (12 год)

Поняття філогенетики, філогенії та філогенетичного аналізу. Методи та алгоритми реконструкції філогенетичних дерев. Поняття топології філогенетичного древа і її визначення. Алгоритми і методи реконструкції

вкорінених і не вкорінених філогенетичних дерев. Види філогенетичних дерев і репрезентація результатів філогенетичного аналізу. Програмне забезпечення: *PYLIP, Clustal, MEGA*. Вбудовані в *ClustalX* інструменти кластеризації послідовностей, формування скобкових конструкцій і їх репрезентація у вигляді філогенетичних дерев.

Практикум: Реконструкція та аналіз філогенетичних дерев: робота з базами даних, формування первинної вибірки, аналіз доменної архітектури і визначення об'єкту кластеризації, вирівнювання фрагментів в програмі *ClustalX*, реконструкція, візуалізація і аналіз філогенетичного дерева засобами програми *MEGA*.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2

Методи моделювання і аналізу молекулярних структур і міжмолекулярних взаємодій

Тема 4. Ключові репозиторії структур макромолекул і низькомолекулярних сполук. Реконструкція просторової структури низькомолекулярних речовин, макромолекул та їх комплексів *de novo*. Джерела інформації про структуру молекул, ключові формати запису і зберігання. Препроцесинг хімічних та структурно-біологічних даних. Верифікація структури низькомолекулярних речовин та біополімерів. Фактор конфірмаційної рухливості і стереоізомерії лігандів. Хіральність молекул. Бібліотеки фрагментів. **(19 год)**

*Основні рівні організації білків: первинна, вторинна (регулярні підструктури: α -спіралі і β -шари), третинна та четвертинна структура. Типи та механізми фолдингу білків. Он-лайн інструменти для прогнозу вторинної структури білка за послідовностями. Методи реконструкції просторової структури: моделювання за гомологією, конформаційний пошук, молекулярний фітінг. CASP і AlphaFold. Консервативні та варіабельні зони білків. Основні репозиторії макромолекул і низькомолекулярних речовин: RCSB Protein Data Bank, PubChem, Zink, ChEMBL тощо. Формат *.pdb. Формати IUPAC, InChI, SMILES, *.mol, *.mol2, *.sd, *.sdf, тощо. Методи та алгоритми моделювання та препроцесингу структури лігандів. Он-лайн та офлайн ресурси та інструменти. Поняття топології і ключові формати її зберігання. Методи кристалографії та ЯМР. Переваги і обмеження інструментальних методів. Порівняння і взаємне доповнення лабораторних і обчислювальних методів. NОС та VMD. Порівняння даних результатів молекулярної динаміки та ЯМР.*

Тема 5. Реконструкція і прогнозування ліганд-білкових і макромолекулярних взаємодій. Ключові поняття. Принципи і механізми впізнавання сайтів і формування комплексів молекул. Можливості відтворення і доказу комплексів за допомогою молекулярного докінгу і молекулярної динаміки. Біоінформатичні методи і інструменти аналізу міжмолекулярних взаємодій. **(25 год)**

Ключові програмні пакети (PyMOL, CCDC Gold, Cresset, BioSolveIT, Schrödinger, BIOVIA Discovery Studio Client, ISIS Draw, Modeler, Chimera, ChemMaster Gromacs, тощо). Молекулярні механізми ліганд-білкової взаємодії і їх наслідки. Процеси підготовки мішеней і лігандів. Підготовка сайту зв'язування. Процес молекулярного докінгу і скринінгу із використанням різних алгоритмів і програмного забезпечення: CCDC GOLD, iGEMDOCK, FlexX, та ін. Фактори, що впливають на якість докінгу. Механізми зв'язування лігандів, фактор розчинника та іншого молекулярного оточення. Інтерпретація результатів молекулярного докінгу. Методи молекулярної механіки і динаміки. Принципи молекулярної динаміки і ключові файли пакету Gromacs. Отримання файлів структурної топології та координат. Призначення, принцип роботи і можливості он-лайн інструменту ProDRG. Запуск обчислень і аналіз результатів молекулярної динаміки в Gromacs. Галузі і прикладі застосування молекулярної динаміки. Програмна і апаратна складові. Віртуальні організації.

Практикум: Реконструкція ліганд-білкових комплексів методом молекулярного докінгу: підготовка структури мішені, підготовка бібліотеки лігандів, молекулярний докінг в програмі CCDC GOLD і аналіз результатів на підставі вбудованих оцінювальних функцій, молекулярний докінг в програмі iGEMDOCK і аналіз результатів на підставі аналітичних інструментів програми. Робота з пакетом BioSolveIT. Оцінювання коректності пози ліганду в програмах PyMOL, RasMOL і BIOVIA Discovery Studio Client.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3

Застосування методів структурної біоінформатики для вирішення задач віртуального скринінгу, фармакофорного пошуку, уточнення молекулярних структур і процесів за допомогою молекулярної динаміки. Застосування ресурсоемних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач.

Тема 6. Віртуальний скринінг і фармакофорний пошук. Ключові принципи, переваги і недоліки методу фармакофорного пошуку. Моделювання фармакофорних моделей і програмні засоби. **(18 год)**

Типи віртуального скринінгу і фармакофорного пошуку. Програми і сервіси. Ключові властивості фармакофору. Вплив моделі фармакофору і стеричних обмежень на результат скринінгу. Прогнозування фармакофору у випадку відсутності первинного комплексу. Комбінація використання методу каталофорів і фармакофорного пошуку. Місто фармакофорного пошуку у протоколах віртуального скринінгу.

Тема 7. Ресурсоемні обчислення в молекулярній біології. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотокових і багато потокових обчислень, використання CPU і GPU обчислень. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Технології Grid і Cloud. Застосування кластерних і Грід обчислень для вирішення різноманітних задач молекулярної динаміки (методи, алгоритми, силові поля, умови, тощо.): підготовка мікро- та макромолекул, параметризація систем, алгоритми команд та файли конфігурації. Засоби кінцевої обробки результатів розрахунку молекулярної

динаміки. Порівняння даних результатів молекулярної динаміки з експериментальними даними x-Ray і ЯМР. (16 год)

Типи ресурсоемних обчислень. Апаратна і програмна складові під час обрахунку молекулярної динаміки і їх вплив на якість і швидкість ресурсоемних обчислень. Використання CUDA. Локальна і дистанційна робота з кластером.

Методи аналізу результатів не рівноважної молекулярної динаміки. Програми для обрахунку і аналізу молекулярної динаміки Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів. Gromacs: параметри tdr-файлів. Gromacs: pulling, freeze, ndx.

Тема 8. Пошук кількісних співвідношень структура-властивість із використанням методів QSAR. (10 год)

Ключові принципи методу і програми. Реалізація QSAR на прикладі програм ChemMastr і Cresset.

Практикум: Опанування методів фармакофорного пошуку на прикладі мережевого інструменту Pharmit. Знайомство з програмним пакетом Cresset.

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ,
ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ, САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ**

№ з/п	Назва лекції	Кількість годин		
		Лекції	Лабораторні роботи	Самостійна Робота
Змістовий модуль 1 <i>Молекулярно-біологічна та інформаційна основа структурної біоінформатики</i>				
1	Тема 1. Ключові поняття, цілі і завдання сучасної біоінформатики та структурної біології. Алгоритми досліджень <i>in silico</i> . Бази даних наукової літератури та їх сервіси. Картування геному. Статистичні методи прогнозу екзонів та інтронів. Депонування і сучасна екосистема молекулярно-біологічної інформації.	2	2	4
2	Тема 2. Визначення консервативних мотивів і доменів як основа первинної функціональної анотації макромолекул. Математична складова вірогідності біоінформатичного прогнозу. Основи алгоритмів і роботи пошукових інструментів родини BLAST (nucleotide blast, protein blast, blastx, tblastn, tblastx psi-blast) особливості оцінки, аналізу і презентації результатів пошуку.	2	2	8
3	Тема 3. Методи, алгоритми і задачі молекулярної філогенетики. Галузі застосування. Біоінформатична реконструкція, візуалізація та аналіз дендрограмм. Математична і програмна складові кладистичного аналізу.	2	-	8
	Практикум: Реконструкція та аналіз філогенетичних дерев: робота з базами даних, формування первинної вибірки, аналіз доменної архітектури і визначення об'єкту кластеризації, вирівнювання фрагментів в програмі ClustalX, реконструкція, візуалізація і аналіз філогенетичного древа засобами програми MEGA	-	2	-
Разом за змістовим модулем 1		6	6	20
Змістовий модуль 2 <i>Методи моделювання і аналізу молекулярних структур і міжмолекулярних взаємодій</i>				
4	Тема 4. Ключові репозиторії структур макромолекул і низькомолекулярних сполук.	3	2	14

	Реконструкція просторової структури низькомолекулярних речовин, макромолекул та їх комплексів <i>de novo</i> . Джерела інформації о структурі молекул, ключові формати запису і зберігання. Препроцесинг хімічних та структурно-біологічних даних. Верифікація структури низькомолекулярних речовин та біополімерів. Фактор конформації і стереоізомерії лігандів. Бібліотеки фрагментів.			
5	Тема 5. Реконструкція і прогнозування ліганд-білкових і макромолекулярних взаємодій. Ключові поняття. Принципи і механізми впізнавання сайтів і формування комплексів молекул. Можливості відтворення і доказу комплексів за допомогою молекулярного докінгу і молекулярної динаміки. Біоінформатичні методи і інструменти аналізу міжмолекулярних взаємодій.	4	-	16
	Практикум: Реконструкція ліганд-білкових комплексів методом молекулярного докінга: підготовка структури мішені, підготовка бібліотеки лігандів, молекулярний докінг в програмі <i>CCDC GOLD</i> і аналіз результатів на підставі вбудованих оцінювальних функцій, молекулярний докінг в програмі <i>iGEMDOCK</i> і аналіз результатів на підставі аналітичних інструментів програми. Робота з пакетом <i>BioSolveIT</i> . Оцінювання коректності пози ліганду в програмах <i>PyMOL</i> , <i>RasMOL</i> і <i>BIOVIA Discovery Studio Client</i> .	-	5	-
Разом за змістовим модулем 2		7	7	30
Змістовий модуль 3 <i>Застосування методів структурної біоінформатики для вирішення задач віртуального скринінгу, фармакофорного пошуку, уточнення молекулярних структур і процесів за допомогою молекулярної динаміки. Застосування ресурсоемних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач.</i>				
6	Тема 6. Віртуальний скринінг і фармакофорний пошуку. Ключові принципи, переваги і недоліки методу фармакофорного пошуку. Моделювання фармакофорних моделей і програмні засоби.	3	3	12
7	Тема 7. Ресурсоемні обчислення в молекулярній біології. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотокових і багато потокових обчислень, використання CPU і GPU обчислень. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Технології Grid і Cloud. Застосування кластерних і Грід обчислень для вирішення різноманітних	2	2	12

	задач молекулярної динаміки (методи, алгоритми, силові поля, умови, тощо.): підготовка мікро- та макромолекул, параметризація систем, алгоритми команд та файли конфігурації. Засоби кінцевої обробки результатів розрахунку молекулярної динаміки. Порівняння даних результатів молекулярної динаміки з експериментальними даними x-Ray і ЯМР.			
8	Тема 8. Пошук кількісних співвідношень структура-властивість із використанням методів QSAR.	2	-	4
	Практикум: Опанування методів фармакофорного пошуку на прикладі мережевого інструменту Pharmit. Знайомство з програмним пакетом Cresset.	-	2	2
Разом за змістовим модулем 3		7	7	30
ВСЬОГО		20	20	80

Загальний обсяг годин – **120 годин** (4 кредити ECTS), у тому числі:
 Лекції – **20 годин**
 Лабораторні роботи – **20 годин**
 Самостійна робота – **80 годин**

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1

Молекулярно-біологічна та інформатична основа структурної біоінформатики

Тема 1. *КЛЮЧОВІ ПОНЯТТЯ, ЦІЛІ І ЗАВДАННЯ СУЧАСНОЇ БІОІНФОРМАТИКИ ТА СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЇ. АЛГОРИТМИ ДОСЛІДЖЕНЬ IN SILICO. БАЗИ ДАНИХ НАУКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ ТА ЇХ СЕРВІСИ. КАРТУВАННЯ ГЕНОМУ. СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ ПРОГНОЗУ ЕКЗОНІВ ТА ІНТРОНІВ. ДЕПОНУВАННЯ І СУЧАСНА ЕКОСИСТЕМА МОЛЕКУЛЯРНО-БІОЛОГІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ. 8 год*

Лекція 1. *ПОНЯТТЯ, ЦІЛІ І ЗАВДАННЯ СУЧАСНОЇ БІОІНФОРМАТИКИ ТА СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЇ. АЛГОРИТМИ І ПРОТОКОЛИ ДОСЛІДЖЕНЬ IN SILICO. СПЕЦІАЛІЗОВАНІ БАЗИ ДАНИХ І БАЗИ ДАНИХ НАУКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ ТА ЇХ СЕРВІСИ. 2 год.*

Практична робота 1. *Анотація і картування індивідуальних генів і геномів. Біоінформатичні методи прогнозування екзон-інтроної структури генів. Депонування молекулярно-біологічної інформації. 2 год.*

Рекомендована література

[1, 2, 4, 5, 6, 8, 9, 11, 12, 13, 14]

Завдання для самостійної роботи: Web-ресурси. NCBI. Swiss-Prot. WWPDB. GenBank. Swiss-Prot. UniProtKB (EMBL / TrEMBL). Protein Data Bank. PubMed. NCBI Genome Data Viewer (GDV / MapViewer). GENMARK. ORF Finder. GenDoc. 4 год.

Рекомендована література

[5, 6, 7, 8, 9]

Тема 2. *ВИЗНАЧЕННЯ КОНСЕРВАТИВНИХ МОТИВІВ І ДОМЕНІВ ЯК ОСНОВА ПЕРВИННОЇ ФУНКЦІОНАЛЬНОЇ АНОТАЦІЇ МАКРОМОЛЕКУЛ. МАТЕМАТИЧНА СКЛАДОВА ВІРОГІДНОСТІ БІОІНФОРМАТИЧНОГО ПРОГНОЗУ. ОСНОВИ АЛГОРИТМІВ І РОБОТИ ПОШУКОВИХ ІНСТРУМЕНТІВ РОДИНИ BLAST (NUCLEOTIDE BLAST, PROTEIN BLAST, BLASTX, TBLASTN, TBLASTX PSI-BLAST) ОСОБЛИВОСТІ ОЦІНКИ, АНАЛІЗУ І ПРЕЗЕНТАЦІЇ РЕЗУЛЬТАТІВ ПОШУКУ. 12 год*

Лекція 2. *ПЕРВИННА ОЦІНКА ФУНКЦІЇ МАКРОМОЛЕКУЛИ НА ПІДСТАВІ НАЯВНОСТІ КОНСЕРВАТИВНИХ МОТИВІВ, ДОМЕНІВ І ПАТЕРНІВ. 2 год.*

Практична робота 2. *Робота з інструментами родини BLAST (blastx, tblastn, tblastx, psi-blast) і аналіз результатів пошуку. 2 год.*

Рекомендована література

[5, 6, 7, 8, 9, 17]

Завдання для самостійної роботи: Гомологія, консервативність, подібність і ідентичність послідовностей і структури біополімерів. Парні та множинні вирівнювання. Особливості символів IUPAC нуклеїнових кислот і амінокислот. Пошук в базах даних NCBI і UniProtKB. Формат *.fasta. Локальні та глобальні, парні та множинні вирівнювання. Прогнозування доменної архітектури: SMART, Pfam і PROSITE. Профілі, патерні і приховані моделі Маркова (HMM). 8 год.

Рекомендована література

[5, 6, 7, 8, 9]

Тема 3. МЕТОДИ, АЛГОРИТМИ І ЗАДАЧІ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ФІЛОГЕНЕТИКИ. ГАЛУЗІ ЗАСТОСУВАННЯ. БІОІНФОРМАТИЧНА РЕКОНСТРУКЦІЯ, ВІЗУАЛІЗАЦІЯ ТА АНАЛІЗ ДЕНДРОГРАММ. МАТЕМАТИЧНА І ПРОГРАМНА СКЛАДОВІ КЛАДИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ. 12 год.

Лекція 3. МЕТОДИ, АЛГОРИТМИ І ЗАДАЧІ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ФІЛОГЕНЕТИКИ. ГАЛУЗІ ЗАСТОСУВАННЯ. 2 год.

Практикум: Реконструкція та аналіз філогенетичних дерев: робота з базами даних, формування первинної вибірки, аналіз доменної архітектури і визначення об'єкту кластеризації, вирівнювання фрагментів в програмі ClustalX, реконструкція, візуалізація і аналіз філогенетичного дерева засобами програми MEGA 2 год

Завдання для самостійної роботи:

Поняття філогенетики, філогенії та філогенетичного аналізу. Методи та алгоритми реконструкції філогенетичних дерев. Поняття топології філогенетичного дерева і її визначення. Алгоритми і методи реконструкції вкорінених і не вкорінених філогенетичних дерев. Види філогенетичних дерев і репрезентація результатів філогенетичного аналізу. Програмне забезпечення: PYLIP, Clustal, MEGA. Вбудовані в ClustalX інструменти кластеризації послідовностей, формування скобкових конструкцій і їх репрезентація у вигляді філогенетичних дерев. 8 год.

Рекомендована література

[15, 6, 8, 9, 11, 12, 13, 14, 37, 40]

Питання до змістового модуля 1

- | | |
|---|--|
| 1. Визначення обчислювальної біології і біоінформатики. | 6. Види баз даних. Ключові біоінформатичні бази даних: GenBank/EMBL/DDBJ, UniProtKB, RCSB Protein Data Bank. PubMed. |
| 2. Основні завдання і цілі біоінформатики. | 7. Основи пошуку біологічної інформації. |
| 3. Поняття геному та протеому. | 8. Інтегровані пошукові системи NCBI і UniProt Consortium. |
| 4. Поняття геноміки та протеоміки. | 9. IUPAC. Формати *.fasta і RAW. |
| 5. Біоінформатичні Web-ресурси. PIR. NCBI. Swiss-Prot. Protein Data Bank. | |

10. Методи біоінформатичного порівняння біологічних послідовностей.
11. Локальні і глобальні вирівнювання.
12. Вагові матриці і їх застосування.
13. Парні, множинні та профільні вирівнювання.
14. Біоінформатичній сенс термінів: консервативність, подібність і ідентичність з точки зору.
15. Мотиви. Патерни. HMM. Альтернативні символи IUPAC.
16. Відмінності організації генів прокариот і еукаріот.
17. Поняття екзону та інтрону.
18. Особливості контекстного визначення екзонів і інтронів.
19. Відкриті рамки зчитування (ORF).
20. Статистичні методи прогнозування екзон-інтронної структури генів.
21. Інструменти пошуку і первинної анотації генів.
22. GENMARK. ORF Finder. GenDoc. NCBI Genome Data Viewer (GDV/Map Viewer).
23. Алгоритми і методи біоінформатичного пошуку послідовностей.
24. Інструменти родини BLAST. nucleotide blast. protein blast. blastx. tblastn. tblastx..
25. Визначення домену білку.
26. Визначення доменного складу та доменної архітектури.
27. Методи біоінформатичного визначення доменів і доменного складу білку.
28. SMART. Pfam. PROSITE. Профілі. Приховані моделі Маркова (HMM).
29. Кладистичні методи. Ключові поняття Філогенії.
30. Кладистичний аналіз і реконструкція філогенетичних дерев.
31. Види і топологія філогенетичних дерев.
32. RYLR і різновиди його інструментів. Пакет MEGA.
33. Скобкові конструкції множинного вирівнювання і їх візуалізація.
34. Картування геномів та масштабуємі системи їх візуалізації і навігації.
35. Ретракція цільових ділянок повногеномних послідовностей і біоінформатичних аналіз окремих локусів.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2

Методи моделювання та аналізу міжмолекулярних взаємодій

Тема 4. КЛЮЧОВІ РЕПОЗИТОРІЇ СТРУКТУР МАКРОМОЛЕКУЛ І НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПЛУК. РЕКОНСТРУКЦІЯ ПРОСТОРОВОЇ СТРУКТУРИ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ РЕЧОВИН, МАКРОМОЛЕКУЛ ТА ЇХ КОМПЛЕКСІВ DE NOVO. ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ О СТРУКТУРІ МОЛЕКУЛ, КЛЮЧОВІ ФОРМАТИ ЗАПИСУ І ЗБЕРІГАННЯ. ПРЕПРОЦЕСІНГ ХІМІЧНИХ ТА СТРУКТУРНО-БІОЛОГІЧНИХ ДАНИХ. ВЕРИФІКАЦІЯ СТРУКТУРИ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ РЕЧОВИН ТА БІОПОЛІМЕРІВ. ФАКТОР КОНФОРМАЦІЇ І СТЕРЕОІЗОМЕРІЇ ЛІГАНДІВ. БІБЛІОТЕКИ ФРАГМЕНТІВ.
19 год.

Лекція 4. РЕКОНСТРУКЦІЯ ПРОСТОРОВОЇ СТРУКТУРИ СТРУКТУР МІКРО-ТА МАКРОМОЛЕКУЛЯРНИХ СТРУКТУР. ФОРМАТИ ЗАПИСУ СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ. ПРЕПРОЦЕСІНГ ХІМІЧНИХ ТА СТРУКТУРНО-БІОЛОГІЧНИХ БАЗ ДАНИХ. 3 год

Практична робота 4. Моделювання і верифікація структури низькомолекулярних речовин та біополімерів. Ключові бази даних лігандів і моделювання структури речовин *de novo*. Бібліотеки фрагментів. Отримання файлів структурної топології та координат лігандів. 2 год

Завдання для самостійної роботи: Моделювання структури низькомолекулярних речовин за допомогою BIOVIA Draw, ISIS Draw, PubChem Sketcher та інших редакторів. Зміст і синтаксис файлів форматів *.pdb, InChI, SMILES, *.mol, *.mol2, *.sd, *.sdf, тощо, а також, похідних файлів топології - *.top, *.itp. Біофізична і хімічна складові формування вторинної структури та фолдингу білків. Програми і сервіси для реконструкції структури низькомолекулярних речовин і біополімерів. Програми: Modeler, I-Tasser, Chimera, PyMOL, BIOVIA Draw і ICM-Browser. Механізми фолдингу і типи структурної організації білків. Мережеві ресурси та інструменти моделювання молекулярної механіки: HyperChem, AmberTOOLS. 14 год.

Рекомендована література

[1, 2, 3, 4, 11, 22, 23, 24,]

Тема 5. РЕКОНСТРУКЦІЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ ЛІГАНД-БІЛКОВИХ І МАКРОМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ. КЛЮЧОВІ ПОНЯТТЯ. ПРИНЦИПИ І МЕХАНІЗМИ ВПІЗНАВАННЯ САЙТІВ І ФОРМУВАННЯ КОМПЛЕКСІВ МОЛЕКУЛ. МОЖЛИВОСТІ ВІДТВОРЕННЯ І ДОКАЗУ КОМПЛЕКСІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ І МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. БІОІНФОРМАТИЧНІ МЕТОДИ І ІНСТРУМЕНТИ АНАЛІЗУ МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ. 25 год.

Лекція 5. ПРОГНОЗУВАННЯ ЛІГАНД-БІЛКОВИХ І МАКРОМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ. ПРИНЦИПИ І МЕХАНІЗМИ ВПІЗНАВАННЯ САЙТІВ І ФОРМУВАННЯ КОМПЛЕКСІВ МОЛЕКУЛ. ВІДТВОРЕННЯ І ДОКАЗ КОМПЛЕКСІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДІВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ І МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. БІОІНФОРМАТИЧНІ МЕТОДИ І ІНСТРУМЕНТИ АНАЛІЗУ МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ. 4 год.

Завдання для самостійної роботи: Взаємодія білків з низькомолекулярними речовинами. Принципи і механізми дослідження перебудов молекул під впливом утворення комплексів з лігандами і молекулярної динаміці. Типи взаємодій білків з низькомолекулярними сполуками. Принципи та механізми ліганд-залежних перебудов білкових мішеней. Отримання файлів топології та координат лігандів. Мережевий сервіс ProDRG: призначення, принцип роботи, можливості і обмеження. Програми для молекулярного докінгу лігандів і білок-білкових взаємодій. Алгоритми молекулярного докінгу засобами програм CCDC Gold, iGEMDOCK, Cresset, BioSolveIT, тощо та ін. 16 год.

Рекомендована література

[1, 2, 3, 4, 7, 10, 11, 20, 21, 25, 26, 28, 29, 30, 31]

Практикум: Реконструкція ліганд-білкових комплексів методом молекулярного докінга: підготовка структури мішені, підготовка бібліотеки лігандів, молекулярний докінг в програмі CCDC GOLD і аналіз результатів на підставі вбудованих оцінювальних функцій, молекулярний докінг в програмі iGEMDOCK і аналіз результатів на підставі аналітичних інструментів програми. Робота з пакетом BioSilveIT. Оцінювання коректності пози ліганду в програмах PyMOL, RasMOL і BIOVIA Discovery Studio Client. **5 год**

Рекомендована література

[1, 2, 3, 4, 7, 10, 11, 20, 21, 25, 26, 28, 29, 30, 31]

Питання до змістового модуля 2

1. Принципи і програми візуалізації структури молекул.
2. Моделювання структури низькомолекулярних речовин.
3. Молекулярна механіка і молекулярна динаміка.
4. Силові поля.
5. Рівні організації білку.
6. Методи реконструкції просторової структури біополімерів
7. Modeler, I-Tasser, Chimera, PyMOL, BIOVIA Draw і ICM-Browser.
8. Взаємодія білків з низькомолекулярними речовинами.
9. Механізми ліганд-залежних перебудов білкових мішеней.
10. Підготовка низькомолекулярних лігандів до молекулярного докінгу і молекулярної динаміки.
11. Отримання файлів топології за допомогою мережевого сервісу ProDRG.
12. Алгоритми і механізми молекулярного докінгу лігандів.
13. Методи прогнозування і моделювання білок-білкових взаємодій.
14. Використання програмного забезпечення для молекулярного докінгу.
15. Алгоритмічні особливості програм Autodock, GOLD, Glide, DOCK і FlexX.
16. Ресурсоємні обчислення в молекулярній біології.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3

Застосування методів структурної біоінформатики для вирішення задач віртуального скринінгу, фармакофорного пошуку, уточнення молекулярних структур і процесів за допомогою молекулярної динаміки. Застосування ресурсоємних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач.

Тема 6. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ СТРУКТУРНОЇ БІОІНФОРМАТИКИ ДЛЯ ВИРІШЕННЯ ЗАДАЧ ВІРТУАЛЬНОГО СКРИНІНГУ, ФАРМАКОФОРНОГО ПОШУКУ, УТОЧНЕННЯ МОЛЕКУЛЯРНИХ СТРУКТУР І ПРОЦЕСІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. ЗАСТОСУВАННЯ

РЕСУРСОЄМНИХ ОБЧИСЛЕНЬ ДЛЯ ВИРІШЕННЯ МОЛЕКУЛЯРНО-БІОЛОГІЧНИХ ЗАДАЧ. 18 год

Лекція 6. ВІРТУАЛЬНИЙ СКРИНІНГ І ФАРМАКОФОРНИЙ ПОШУКУ. КЛЮЧОВІ ПРИНЦИПИ, ПЕРЕВАГИ І НЕДОЛІКИ МЕТОДУ ФАРМАКОФОРНОГО ПОШУКУ. МОДЕЛЮВАННЯ ФАРМАКОФОРНИХ МОДЕЛЕЙ І ПРОГРАМНІ ЗАСОБИ. 3 год.

Практична робота 6. Типи віртуального скринінгу і фармакофорного пошуку. Програми і сервіси. Ключові властивості фармакофору. Вплив моделі фармакофору і стеричних обмежень на результат скринінгу. Прогнозування фармакофору у випадку відсутності первинного комплексу. Комбінація використання методу каталофорів і фармакофорного пошуку. **3 год.**

Завдання для самостійної роботи: Типи ресурсоємних обчислень. Апаратна і програмна складові під час обрахунку молекулярної динаміки і їх вплив на якість і швидкість ресурсоємних обчислень. Використання CUDA. Рівноважна та нерівноважна молекулярна динаміка. Методи аналізу розрахунку нерівноважної молекулярної динаміки. Технології Grid і Cloud. Основи та алгоритми молекулярної динаміки. Програми для моделювання молекулярної динаміки. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів і макромолекулярних комплексів. **12 год.**

Рекомендована література

[1, 2, 3, 4, 7, 10, 11, 20, 21, 23, 30, 31, 36, 40]

Тема 7. РЕСУРСОЄМНІ ОБЧИСЛЕННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ БІОЛОГІЇ. ОПТИМІЗАЦІЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ РЕСУРСІВ, ПЕРЕВАГИ ОДНОПОТОКОВИХ І БАГАТО ПОТОКОВИХ ОБЧИСЛЕНЬ, ВИКОРИСТАННЯ CPU І GPU ОБЧИСЛЕНЬ. СПЕЦІАЛІЗОВАНІ СЕРВІСИ, ВІРТУАЛЬНІ ОРГАНІЗАЦІЇ, ВИКОРИСТАННЯ ВІДДАЛЕНОГО І СПІЛЬНОГО ДОСТУПУ. ТЕХНОЛОГІЇ GRID І CLOUD. ЗАСТОСУВАННЯ КЛАСТЕРНИХ І ГРІД ОБЧИСЛЕНЬ ДЛЯ ВИРІШЕННЯ РІЗНОМАНІТНИХ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ (МЕТОДИ, АЛГОРИТМИ, СИЛОВІ ПОЛЯ, УМОВИ, ТОЦО.): ПІДГОТОВКА МІКРО- ТА МАКРОМОЛЕКУЛ, ПАРАМЕТРИЗАЦІЯ СИСТЕМ, АЛГОРИТМИ КОМАНД ТА ФАЙЛИ КОНФІГУРАЦІЇ. ЗАСОБИ КІНЦЕВОЇ ОБРОБКИ РЕЗУЛЬТАТІВ РОЗРАХУНКУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. ПОРІВНЯННЯ ДАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ З ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИМИ ДАНИМИ X-RAY І ЯМР. 16 год

Лекція 7. ТИПИ РЕСУРСОЄМНИХ ОБЧИСЛЕНЬ. АПАРАТНА І ПРОГРАМНА СКЛАДОВІ ПІД ЧАС ОБРАХУНКУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ І ЇХ ВПЛИВ НА ЯКІСТЬ І ШВИДКІСТЬ РЕСУРСОЄМНИХ ОБЧИСЛЕНЬ. ВИКОРИСТАННЯ CUDA. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ НЕ РІВНОВАЖНОЇ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. ПРОГРАМИ ДЛЯ ОБРАХУНКУ І АНАЛІЗУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. GROMACS: ПАРАМЕТРИ MDP-ФАЙЛІВ. GROMACS: pulling, freeze, ndx. 2 год.

Практична робота 7. Підготовка систем і запуск обчислення задач молекулярної механіки і молекулярної динаміки. 2 год.

Завдання для самостійної роботи: Програмний пакет Gromacs: алгоритми команд, файли конфігурації і топології. Поетапна робота з Gromacs на обчислювальному кластері: параметри mdp-файлів. Gromacs: pulling, freeze, ndx. Обробка результатів розрахунку молекулярної динаміки. Програми: NОC, VMD та РuMOL. Методи кристалографії та ЯМР. Обмеження і переваги експериментальних і обчислювальних методів. 8 год.

Рекомендована література

[3, 4, 5, 8, 15, 33, 34, 35]

Тема 8. ПОШУК КІЛЬКІСНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ СТРУКТУРА-ВЛАСТИВІСТЬ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДІВ QSAR. 10 год.

Лекція 8. ОПАНУВАННЯ МЕТОДІВ ФАРМАКОФОРНОГО ПОШУКУ НА ПРИКЛАДІ МЕРЕЖЕВОГО ІНСТРУМЕНТУ PHARMIT. ЗНАЙОМСТВО З ПРОГРАМНИМ ПАКЕТОМ CRESSET. 2 год.

Практикум: Опанування методів фармакофорного пошуку на прикладі мережевого інструменту Pharmit. Знайомство з програмним пакетом Creset. 2 год.

Завдання для самостійної роботи: Історія розвитку методу QSAR. Види QSAR. 3D-QSAR. 6 год.

Рекомендована література

[2, 3, 4, 10, 11]

Питання до змістового модуля 3

1. Використання CPU і GPU (CUDA).
2. Обчислення в GRID-технології.
3. Основи молекулярної механіки і молекулярної динаміки молекул.
4. Методи аналізу результатів молекулярної динаміки.
5. Gromacs: pulling, freeze, ndx.
6. Пакет Gromacs: алгоритми команд та файли конфігурації.
7. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів.
8. Протокол запуску обчислень Gromacs на кластері.
9. Обробка результатів розрахунку молекулярної динаміки.
10. Програми NОC та VMD.
11. Обмеження і переваги експериментальних і обчислювальних методів молекулярної динаміки.

Перелік запитань до заліку

1. Визначення біоінформатики. Структурна біоінформатика.
2. Основні цілі і завдання .
3. Поняття геному та протеому біоінформатики.
4. Геноміка і протеоміка.
5. Екосистема основних біоінформатичних web-ресурсів: NCBI, UniProt, PIR і Protein Data Bank.
6. Види баз даних. GenBank. Swiss-Prot. EMBL. TREMBL. PDB. PubMed.
7. Організація і основи пошуку молекулярно-біологічної інформації.
8. Формати депонування і зберігання послідовностей в базах даних. Fasta формат. RAW-формат.
9. Методи порівняння біологічних послідовностей.
10. Локальні і глобальні вирівнювання послідовностей.
11. Вагові матриці. Їх види і призначення.
12. Парні та множинні вирівнювання. Види множинних вирівнювань.
13. Консервативність, подібність і ідентичність.
14. Мотиви. Патерни. Підстановлювальні символи IUPAC для нуклеотидів і амінокислот.
15. Відмінності організації генів прокариот і еукариот.
16. Поняття екзону та інтрону.
17. Особливості контексту екзонно-інтронної структури генів.
18. Відкриті рамки зчитування (ORF).
19. Методи прогнозування екзонно-інтронної структури генів.
20. Біоінформатичні інструменти пошуку і анотації генів.
21. ORF Finder. MapWiver. GENMARK. GenDoc.
22. Алгоритми пошуку послідовностей за гомологією.
23. Родина алгоритмів BLAST. nucleotide blast. protein blast. blastx. tblastn. tblastx..
24. Поняття домену білку.
25. Поняття доменного складу та доменної архітектури.
26. Методи біоінформатичного визначення доменів і доменної архітектури.
27. Мережеві сервіси PROSITE, Pfam і SMART. Профілі. Приховані моделі Маркова.
28. Поняття філогенетики, філогенії та філогенетичного аналізу.
29. Реконструкція філогенетичних древ. Визначення топології і алгоритми.
30. Види філогенетичних древ.
31. Програмне забезпечення:
32. ClustalX, MEGA.
33. Вбудовані в Clustal інструменти кластеризації послідовностей.
34. Ключові репозиторії структурних файлів макромолекул і низькомолекулярних сполук. Бібліотеки фрагментів.
35. Реконструкція просторової структури низькомолекулярних речовин, макромолекул та їх комплексів de novo.
36. Фундаментальні принципи і програми для візуалізації молекулярних даних.
37. Джерела інформації о структурі молекул, ключові формати запису і зберігання.
38. Конформаційна мінливість і стереоізомерії лігандів.
39. Силкові поля. Препроцесінг хімічних та структурно-біологічних даних.
40. Рівні організації білку.
41. Методи реконструкції просторової структури біополімерів
42. Modeler, ICM, Gaussian, Chimera.
43. PyMOL
44. Визначення фармакофору, фармакофорний пошук.

45. QSAR. Визначення, види, програми.
46. База даних CSD. Ресурси, програми і місія Кембриджського кристалографічного центру.
47. Методи біоінформатичного аналізу міжмолекулярних взаємодій.
48. Механізми молекулярного впізнавання і формування білок-лігандного комплексу.
49. Сили нековалентних взаємодій.
50. Ліганд-білкове припасування. Важливість для задач докінгу і віртуального скринінгу.
51. Взаємодія білків з низькомолекулярними речовинами. Реконструкція ліганд-білкових комплексів.
52. Молекулярні механізми ліганд-білкової взаємодії і їх наслідки.
53. Інтерпретація молекулярних даних на підставі результатів молекулярного докінгу і молекулярної динаміки.
54. Отримання файлів структурної топології та координат лігандів. Призначення, принцип роботи і можливості он-лайн інструменту
55. Механізми ліганд-білкових і білок-білкових взаємодій.
56. Типи та механізми молекулярного докінгу.
57. Білок-білкові взаємодії.
58. Використання програмного забезпечення для молекулярного докінгу.
59. Алгоритми роботи програмного забезпечення для скринінгу та молекулярного докінгу: GOLD, iGEMDOCK, FlexX, AutoDock, Glide, HEX, DOCK, та ін.
60. Ресурсоємні обчислення в молекулярній біології. Застосування ресурсоємних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач.
61. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотокових і багатопотокових обчислень, використання CPU і GPU обчислень.
62. Технології Grid і Cloud.
63. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Grid.
64. Робота з кластером. Застосування кластерних і Грід обчислень для вирішення різноманітних задач молекулярної динаміки.
65. Основи молекулярної динаміки білків та полінуклеотидів.
66. Вирішення задач молекулярної динаміки: підготовка, параметризація систем, алгоритми команд, файли конфігурації.
67. Методи аналізу результатів розрахунку молекулярної динаміки.
68. Gromacs: pulling, freeze, ndx.
69. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів.
70. Поетапна постановка задач структурних обчислень і робота з кластером. Локальна і дистанційна робота з кластером.
71. Обробка результатів розрахунку молекулярної динаміки.
72. Апаратна і програмна складові під час обрахунку молекулярної динаміки і їх вплив на якість і швидкість ресурсоємних обчислень.
73. Методи кристалографії та ЯМР. Переваги і обмеження інструментальних методів.
74. Порівняння і взаємне доповнення лабораторних і обчислювальних методів структурної біоінформатики. NOC та VMD.
75. Порівняння результатів молекулярної динаміки та даних ЯМР.

Контроль знань і розподіл балів, які отримують здобувачі

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

У змістовий модуль 1 (ЗМ1) входять теми 1-3, у змістовий модуль 2 (ЗМ2) – теми 4-5, у змістовий модуль 3 (ЗМ3) – теми 6-8.

Види контролю – поточний, модульний і підсумковий.

Поточний контроль здійснюється під час проведення навчальних занять і має на меті перевірку засвоєння аспірантами навчального матеріалу. Форма проведення поточного контролю під час навчальних занять: усне опитування, письмовий контроль, тестовий, самооцінювання, перевірка практичних навичок. Максимальна кількість балів, яку аспірант може отримати за результатами виконання завдань поточного контролю в кожному зі змістовних модулів, наведена у таблиці.

Обов'язковим для заліку є відпрацювання всіх практичних занять. У випадку відсутності аспіранта, він може відпрацювати пропущене заняття у позааудиторний час (пропущених занять не може бути більше половини від загальної кількості занять).

Оцінювання за формами поточного контролю:

Коефіцієнт 2,5

	ЗМ1		ЗМ2		ЗМ3	
	Min. – 9 балів	Max. – 15 балів	Min. – 6 балів	Max. – 10 балів	Min. – 9 балів	Max. – 15 балів
Відповідь	„3” x 3 = 9	„5” x 3 = 15	„3” x 2 = 6	„5” x 2 = 10	„3” x 3 = 9	„5” x 3 = 15
«3/5» – мінімальна/максимальна оцінка, яку може отримати аспірант.						

Для аспірантів, які набрали кількість балів, що поступаються *критично-розрахунковому мінімуму (60 балів)*, для складання заліку обов'язкове проходження додаткового тестування.

Підсумковий контроль проводиться на останньому практичному занятті і складається із суми балів усіх змістових модулів.

Загальна кількість балів, які можуть отримати студенти з курсу «Структурна біоінформатика»

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Змістовий модуль 3	Залік (підсумкова оцінка)
Мінімум	22,5	15	22,5	60
Максимум	37,5	25	37,5	100

Підсумкова рейтингова оцінка з курсу «Структурна біоінформатика» виставляється після ознайомлення з повним обсягом лекцій з даної дисципліни та за умови наявності конспекту прослуханих лекцій. В разі відсутності аспіранта при модульному контролі з поважних причин, які підтверджені документально, він має право перескладання впродовж двох тижнів. При неявці аспіранта у зазначений термін без поважних причин кількість балів даного модуля дорівнює нулю.

Контроль знань.

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

При цьому, кількість балів:

- **1-34** відповідає оцінці «незадовільно» з обов'язковим повторним вивченням дисципліни;
- **35-39** відповідає оцінці «незадовільно» з можливістю повторного складання;
- **40-60** відповідає оцінці «задовільно» («достатньо»);
- **61-69** відповідає оцінці «задовільно»;
- **70 - 80** відповідає оцінці «добре»;
- **81 - 89** відповідає оцінці «добре» («дуже добре»);
- **90 - 100** відповідає оцінці «відмінно».

Шкала оцінювання академічної успішності аспіранта

Рівень досягнень, % /Marks, (бали за освітню діяльність)	Оцінка ЄКТС/ECTS	Оцінка за національною шкалою (National grade)	
90 – 100	A	відмінно (Excellent)	зараховано
82 – 89	B	добре (Good)	
74 – 81	C		
64 – 73	D	задовільно (Satisfactory)	
60 – 63	E		
35 – 59	FX	незадовільно (Fail) з можливістю повторного складання	не зараховано
1 – 34	F	незадовільно (Fail) з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	

Методи навчання

Пояснювально-ілюстративні, частково-пошукові, проблемного викладання матеріалу, дослідницькі.

Технічні засоби навчання

Проектор мультимедійний Epson EMP-S42, 2, рік введення в експлуатацію – 2004; ноутбук, екран, Zoom/Google Meet — сервіси для дистанційного навчання та он-лайн консультацій.

Матеріальне забезпечення дисципліни

Аудиторії ДУ «ІХБГ НАН України», лабораторія біоінформатики та структурної біології ДУ «ІХБГ НАН України».

Рекомендована література

Основна література

1. Jenny Gu, Bourne P.E. Structural Bioinformatics. 2nd Ed. (ISBN: 978-0-470-18105-8) – Wiley-Blackwell. 2009 – 1035 p.
2. Walter Filgueira de Azevedo Jr. Docking Screens for Drug Discovery. Methods in Molecular Biology #2053 (Springer Protocols). New York, NY 10013, U.S.A. – 2024. - 286 p. (<https://www.springer.com/series/7651>). <https://doi.org/10.1007/978-1-4939-9752-7>
3. Hans-Dieter Höltje, Wolfgang Sippl, Didier Rognan, Gerd Folkers. Molecular Modeling: Basic Principles and Applications, 3rd Edition. Wiley: 2008. - 320 p. (ISBN: 978-3-527-31568-0)
4. Drug Design: Structure- and Ligand-Based Approaches. Edited by Kenneth M. Merz, Dagmar Ringe and Charles H. Reynolds Frontmatter / Cambridge University Press. - 2010. - 286 p. (ISBN: 9780521887236)
5. Claverie J.-M. and C. Noterndame. Bioinformatics for Dummies. Wiley Publishing. – 2007. – 452p.
6. Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette BIOINFORMATICS A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins. 2001. – 784p.
7. File Format Documentation – World Wide Protein Data Bank, 2007 - <http://www.wwpdb.org/docs.html>
8. Higgins D. and W. Taylor. Bioinformatics. Sequence, structure and databanks. OXFORD university press. -2000. - 249p.
9. Mount D.W. Bioinformatics Sequence and genome analysis -2003.– 564.
10. Docking Screens for Drug Discovery. Springer New York, 2019. Ed. Walter Filgueira de Azevedo Jr. DOI: 10.1007/978-1-4939-9752-7, ISBNs 978-1-4939-9751-0, 978-1-4939-9752-7
11. Computational Drug Discovery and Design: Methods and Protocols. Ed. Riccardo Baron. Methods in Molecular Biology (MIMB, volume 819). Humana Totowa, NJ 2012. 628 p. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-1-61779-465-0>; ISBN: 978-1-61779-464-3; ISBN: 978-1-4939-6227-3.

Додаткова література

12. The Plant Cytoskeleton: a Key Tool for Agro-Biotechnology. Ed. By Ya.B. Blume, W.V. Baird, A.I. Yemets, D. Breviario. – 2008., Springer, Netherlands. – P.373-397.
13. Karpov, P.A., Nadezhdina, E.S., Emets, A.I. *et al.* Bioinformatic search of plant protein kinases involved in the phosphorylation of microtubular proteins and the regulation of the cell cycle. *Cytol. Genet.* **43**, 201–215 (2009). <https://doi.org/10.3103/S0095452709030104>
14. Karpov P.A., Nadezhdina E.S., Yemets A.I., Matusov V.G., Nyporko A.Yu., Shashina N.Yu. Blume Ya.B. Bioinformatic Search of Plant Microtubule- and Cell Cycle Related Serine-Threonine Protein Kinases. // BMC Genomics 2010, 11(Suppl 1): S14. - [doi:10.1186/1471-2164-11-S1-S14](https://doi.org/10.1186/1471-2164-11-S1-S14).
15. Karpov, P.A., Emets, A.I., Matusov, V.G. *et al.* Bioinformatics search for plant homologues of Ste20-like serine/threonine protein kinases. *Cytol. Genet.* **43**, 419–428 (2009). <https://doi.org/10.3103/S0095452709060097>

16. Karpov, P.A., Sheremet, Y.A., Blume, Y.B. *et al.* Studying the Role of Protein Kinases CK1 in Organization of Cortical Microtubules in *Arabidopsis thaliana* Root Cells. *Cytol. Genet.* **53**, 441–450 (2019). <https://doi.org/10.3103/S0095452719060033>
17. Karpov, P.A., Novozhylov, D.O., Isayenkov, S.V. *et al.* Motif-Based Prediction of Plant Tubulin Phosphorylation Sites Associated with Calcium-Dependent Protein Kinases in *Arabidopsis thaliana*. *Cytol. Genet.* **52**, 428–439 (2018). <https://doi.org/10.3103/S0095452718060038>
18. Karpov, P.A., Blume, Y.B. Is Casein Kinase 2 Able to Phosphorylate Plant α -Tubulin?. *Cytol. Genet.* **52**, 103–111 (2018). <https://doi.org/10.3103/S0095452718020044>
19. Chudinova EM, Karpov PA, Fokin AI, Yemets AI, Lytvyn DI, Nadezhdina ES, Blume YB. MAST-like protein kinase IREH1 from *Arabidopsis thaliana* colocalizes with the centrosome when expressed in animal cells. *Planta.* 2017; 246 (5): 959–969.
20. Rayevsky A., Sharifi M., Samofalova D., Demchuk O., Karpov P., Blume Ya. In silico mechanistic model of microtubule assembly inhibition by selective chromone derivatives, *Journal of Molecular Structure*, Vol. 1241, 2021, 130633, ISSN 0022-2860, <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130633>.
21. Rayevsky A., Samofalova D., Ishchenko L., Vygovska L., Mazur V., Labudzynskiy D., Borysov O., Spivak S., Ozheredov S., Bulgakov E., Stykhylias M., Blume Ya., Karpov P. Structure-based virtual screening and biological evaluation of novel inhibitors of mycobacterium Z-ring formation. *J Cell Biochem.* 2022 May;123(5):852-862. doi: 10.1002/jcb.30232. Epub 2022 Mar 16. Erratum in: *J Cell Biochem.* 2022 Sep;123(9):1525. PMID: 35297088.
22. Karpov P.A., Ozheredov S.P., Steshenko A.O., Spivak S.I., Blume Ya.B. Bioinformatical View on the Contribution of MAST/IRE-Dependent Phosphorylation in the Tubulin Code. *Cytology and Genetics*, 2024, Vol. 58, No. 3, pp. 202–213. DOI: 10.3103/S0095452724030058
23. Kustovskiy Y, Karpov P, Blume Y, Yemets A. Ivermectin affects *Arabidopsis thaliana* microtubules through predicted binding site of β -tubulin. *Plant Physiol Biochem.* 2024 Jan;206:108296. doi: 10.1016/j.plaphy.2023.108296. Epub 2023 Dec 19. PMID: 38141401.
24. Platonov M, Maximyuk O, Rayevsky A, Iegorova O, Hurmach V, Holota Y, Bulgakov E, Cherninskyi A, Karpov P, Ryabukhin S, Krishtal O, Volochnyuk D. Integrated workflow for the identification of new GABAAR positive allosteric modulators based on the in silico screening with further in vitro validation. Case study using Enamine's stock chemical space. *Mol Inform.* 2024 Feb;43(2):e202300156. doi: 10.1002/minf.202300156. Epub 2024 Jan 24. PMID: 37964718.
25. Rayevsky A, Bulgakov E, Sharifi M, Samofalova D, Ozheredov D, Karpov P, Pantano S, Blume Y. In silico induced effect of N- ϵ -lysine acetylation on microtubule stability and subsequent interaction of microtubule-associated proteins. *Cell Biol Int.* 2023 Sep;47(9):1547-1557. doi: 10.1002/cbin.12052. Epub 2023 Jun 5. PMID: 37272280.
26. Rayevsky A., Samofalova D., Ishchenko L., Vygovska L., Mazur V., Labudzynskiy D., Borysov O., Spivak S., Ozheredov S., Bulgakov E., Stykhylias M., Blume Ya., Karpov P. Structure-based virtual screening and biological evaluation of novel inhibitors of mycobacterium Z-ring formation. *J Cell Biochem.* 2022

May;123(5):852-862. doi: 10.1002/jcb.30232. Epub 2022 Mar 16. Erratum in: J Cell Biochem. 2022 Sep;123(9):1525. PMID: 35297088.

27. Rayevsky A., Ozheredov D.S., Samofalova D., Ozheredov S.P., Karpov P.A., Blume Ya.B. The Role of Posttranslational Acetylation in the Association of Autophagy Protein ATG8 with Microtubules in Plant Cells. *Cytol. Genet.* 55, 510–518 (2021). <https://doi.org/10.3103/S0095452721060128>

28. Yamamoto S, Saito R, Nakamura S, Sogawa H, Karpov P, Shulga S, Blume Y, Kurita N. Proposal of Potent Inhibitors for a Bacterial Cell Division Protein FtsZ: Molecular Simulations Based on Molecular Docking and ab Initio Molecular Orbital Calculations. *Antibiotics (Basel)*. 2020 Nov 26;9(12):846. doi: 10.3390/antibiotics9120846. PMID: 33256135; PMCID: PMC7761175.

29. Karpov, P.A., Rayevsky, A.V., Sheremet, Y.A., Yemets A.I., Blume Ya.B. Structural Biological Characteristics of CK1-Like Protein Kinase Isoforms Associated with Regulation of Plant Microtubules. *Cytol. Genet.* 54, 293–304 (2020). <https://doi.org/10.3103/S0095452720040052>

30. Sato R, Vohra S, Yamamoto S, Suzuki K, Pavel K, Shulga S, Blume Y, Kurita N. Specific interactions between tau protein and curcumin derivatives: Molecular docking and ab initio molecular orbital simulations. *J Mol Graph Model*. 2020 Jul;98:107611. doi: 10.1016/j.jmgl.2020.107611. Epub 2020 Mar 31. PMID: 32276176.

31. Sogawa H., Sato R., Suzuki K., Tomioka S., Shinzato T., Karpov P., Shulga S., Blume Ya., Kurita N. Binding sites of Zantrin inhibitors to the bacterial cell division protein FtsZ: Molecular docking and ab initio molecular orbital calculations, *Chemical Physics*, Volume 530, 2020, 110603, ISSN 0301-0104, <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2019.110603>.

32. Karpov, P.A., Sheremet, Y.A., Blume, Y.B., Yemets A.I. Studying the Role of Protein Kinases CK1 in Organization of Cortical Microtubules in Arabidopsis thaliana Root Cells. *Cytol. Genet.* 53, 441–450 (2019). <https://doi.org/10.3103/S0095452719060033>

33. Demchuk O. M., Karpov P.A., Blume Ya.B. Docking Small Ligands to Molecule of the Plant FtsZ Protein: Application of the CUDA Technology for Faster Computations. *Cytology and Genetics* 05/2012; 46(3):172-179. DOI:10.3103/S0095452712030048

34. Karpov P.A., Demchuk O.M., Britsun V.M., Lytvyn D.I., Pydiura M.O., Rayevsky O.V., Samofalova D.O., Spivak S.I., Volochnyuk D.M., Yemets A.I., Blume Ya.B.: New imidazole inhibitors of mycobacterial FtsZ: the way from high-throughput molecular screening in Grid up to in vitro verification. *Nauka innov.* 2016, 12(3):44-59., DOI:10.15407/scin12.03.044

35. Karpov P.A., Brytsun V.M., Rayevsky A.V., Demchuk O.M., Pydiura N.O., Ozheredov S.P., Samofalova D.A., Spivak S.I., Yemets A.I., Kalchenko V.I., Blume Ya.B. High-throughput Screening of New Antimitotic Compounds Based on Potential of Virtual Organization CSLabGrid. *Nauka innov.*(ISSN 2413-497X) 01/2015, 11(1): 92-100

Рекомендовані навчальні і наукові канали YouTube:

- RCSB Protein Data Bank - <https://www.youtube.com/@RCSBProteinDataBank>

- Protein Data Bank in Europe - PDBe -
<https://www.youtube.com/@ProteinDataBank>
- EMBL-EBI: <https://www.youtube.com/@EMBL-EBI>
- National Library of Medicine - <https://www.youtube.com/@NLMNIH>
- UniProt - <https://www.youtube.com/@uniprotvideos>
- PyMOL Ross - <https://www.youtube.com/@pymolross>
- SchrödingerTV - <https://www.youtube.com/@SchrodingerTV>
- CCDCCambridge - <https://www.youtube.com/@CCDCCambridge>
- MolSoft Molecules in Silico - <https://www.youtube.com/@MolSoftHelp>
- Basic Science Series English - <https://www.youtube.com/@BasicScienceSeries>
- BioExcel CoE - <https://www.youtube.com/@BioExcelCoE>
- Cresset - https://www.youtube.com/@Cressetgroup_software_services
- BioPandit - <https://www.youtube.com/@BioPandit>
- Dr. Majid Ali - <https://www.youtube.com/@MajidAli2020>
- Ensembl Training - <https://www.youtube.com/@EnsemblHelpdesk>
- Erik Lindahl - <https://www.youtube.com/@eriklindahl>
- Maciej Stawikowski -
<https://www.youtube.com/@maciejstawikowski858/featured>
- Molecular Memory - <https://www.youtube.com/@MolecularMemory>
- Sanket Bapat "Simple Bioinformatics" -
<https://www.youtube.com/@sanketbapat>
- Swanson Does Science - <https://www.youtube.com/@swansondoesscience1565>
- Український національний грид (УНГ) - <http://ung.bitp.kiev.ua/ua/>
- EGI: Open Ecosystem for Research and Innovation - www.egi.eu

Розділи у монографіях:

36. Karpov P.A., Yemets A.I., Blume Ya.B. Calmodulin in Action: CaM Protein Kinases as Canonical Targets in Plant Cell. In: Calmodulin: Structure, Mechanisms and Functions, (Ed. V. Ohme), Nova Science Publishers, Inc. (USA), 2019, pp.1-38 <https://novapublishers.com/shop/calmodulin-structure-mechanisms-and-functions/>
37. Karpov P.A., Blume Y.B: Bioinformatic search for plant homologues of animal structural MAPs in the. The Plant Cytoskeleton: a Key Toolfor Agro-Biotechnology, 10/2008: chapter 18: pages 373-397; Springer, Netherlands., ISBN: 978-1-4020-8843-8
38. Sakhno L.O., Yemets A.I., Blume Y.B. The Role of Ascorbate-Glutathione Pathway in Reactive Oxygen Species Balance Under Abiotic Stresses. In: Reactive Oxygen, Nitrogen and Sulfur Species in Plants: Production, Metabolism, Signaling and Defense Mechanisms (Eds. M. Hasanuzzaman, V. Fotopoulos, K. Nahar, M. Fujita), Wiley-Blackwell, 2019, V.1, p. 89-111. DOI: 10.1002/9781119468677.ch4
39. Yemets A.I., Karpets Y.V., Kolupaev Y.E., Blume Y.B. Emerging Technologies for Enhancing ROS/RNS Homeostasis. In: Reactive Oxygen, Nitrogen and Sulfur Species in Plants (Eds. M. Hasanuzzaman, V. Fotopoulos, K. Nahar, M. Fujita), Wiley-Blackwell, 2019, V.2, p. 873-922. DOI: 10.1002/9781119468677.ch39

40. Samofalova D.O., Karpov P.A., Raevsky A.V., Blume Ya.B. 2020. Interplay of Protein Phosphatases with Cytoskeleton Signaling in Response to Stress Factors in Plants. In book: Protein Phosphatases and Stress Management in Plants Chapter: 14 Publisher: Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-48733-1_14