

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 № 10 від 12 квітня 2023 р.



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СТРУКТУРНА БІОІНФОРМАТИКА

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

спеціальність 091 «Біологія та біохімія»

профілі підготовки «Біотехнологія», «Молекулярна генетика»,
«Цитологія, клітинна біологія, гістологія»

Шифр за ОНП – ВК 2.1.

КИЇВ – 2023

Робоча програма навчальної дисципліни «**Структурна біоінформатика**» для здобувачів вищої освіти ступеня доктор філософії *галузі знань* 09 «Біологія» за спеціальністю 091 «Біологія та біохімія» за профілями підготовки «Біотехнологія», «Молекулярна генетика», «Цитологія, клітинна біологія, гістологія». «12» квітня 2023 року – 25 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 № 6 від «12» квітня 2023 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

11 квітня 2023 року

© Карпов П.А., 2023 рік
© _____, 202__ рік
© _____, 202__ рік

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» за профілями підготовки «Біотехнологія», «Молекулярна генетика», «Цитологія, клітинна біологія, гістологія».

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

Викладається у 4 семестрі II курсу аспірантури **в обсязі – 90 год. (3 кредити ECTS)** зокрема: *лекції – 16 год, практичні роботи – 14 год, самостійна робота – 60 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.

Згідно з вимогами освітньо-наукової програми шляхом формування Загальних та Спеціальних компетенцій аспірант повинен:

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.

СК01. Бути здатним планувати і здійснювати комплексні оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які створюють нові знання у біології та дотичних до неї міждисциплінарних напрямках і можуть бути опубліковані у наукових виданнях з біології та суміжних галузей.

СК02. Бути здатним усно і письмово презентувати та обговорювати результати наукових досліджень та/або інноваційних розробок українською та англійською мовами, розуміти англомовні наукові тексти за напрямом досліджень.

СК03. Бути здатним застосовувати сучасні інформаційні технології, бази даних та інші електронні ресурси, спеціалізоване програмне забезпечення у науковій та навчальній діяльності.

СК05. Бути здатним виявляти, формулювати та вирішувати проблеми дослідницького характеру в галузі біології, оцінювати та забезпечувати якість досліджень, які проводять.

СК06. Бути здатним ініціювати, розробляти і реалізовувати комплексні інноваційні проекти в біології та дотичні до неї міждисциплінарні проекти.

СК07. Бути здатним дотримуватись етики досліджень, а також правил академічної доброчесності в наукових дослідженнях та науково-педагогічній діяльності.

СК08. Бути здатним формувати системний науковий світогляд та загальнокультурний кругозір.

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен:

РН01. 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 основних репозиторіях спеціалізованих ресурсів; розрізняти і розуміти основні типи форматів молекулярно-біологічної інформації, вміти користуватися архівними, керованими та похідними базами даних, розуміти основи депонування, керування та отримання молекулярно-біологічної інформації з основних спеціалізованих ресурсів*).

РН02. 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.

РН03. 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 наукові літератури, визначати ключові критерії пошуку, розуміти*

будову і взаємозв'язок між депонованими публікаціями і статтями інших спеціалізованих баз даних що містять молекулярно- і структурно-біологічну інформацію).

РН04. 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 алгоритми молекулярного моделювання і опанувати мережеві і локальні інструменти для реконструкції і верифікації структури макромолекул, лігандів і мультимолекулярних комплексів*).

РН05. Планувати і виконувати експериментальні та/або теоретичні дослідження з біології та дотичних міждисциплінарних напрямків 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*).

РН06. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи (*вміти визначати доменну архітектуру білків, скласти патерни, мотиви і логи, відповідно до задач власних досліджень, розуміти основні принципи методів профільної анотації макромолекул; виконувати аналіз амінокислотних і нуклеотидних послідовностей, прогнозувати і моделювати їх просторову структуру та функцію*).

РН08. 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*).

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» за профілями підготовки «Біотехнологія», «Молекулярна генетика», «Цитологія, клітинна біологія, гістологія».

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» за профілями підготовки «Біотехнологія», «Молекулярна генетика», «Цитологія, клітинна біологія, гістологія».

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

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. **(10 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 досліджень та відкриттів що впливали на становлення та розвиток біоінформатики. 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. Формати структурної інформації. Організація генів прокаріот 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. NCBI.

Тема 2. Визначення консервативних мотивів і доменів як основа первинної функціональної анотації макромолекул. Математична складова вірогідності біоінформатичного прогнозу. Алгоритмічні основи роботи пошукових інструментів родини BLAST (nucleotide blast, protein blast, blastx, tblastn, tblastx, psi-blast) особливості оцінки, аналізу, постпроцесінгу і презентації результатів пошуку **(10 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.

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*. Принципи і різновиди молекулярного докінгу. Джерела інформації о структурі молекул, ключові формати запису і зберігання структурних файлів. Препроцесинг хімічних та структурно-біологічних даних. Верифікація структури низькомолекулярних речовин та біополімерів. Фактор конформаційної мінливості і стереоізомерії лігандів (хіральність молекул). Бібліотеки фрагментів. (14 год)

Основні рівні організації білків: первинна, вторинна: α -спіралі і β -шари, третинна та четвертинна структури. Типи та механізми фолдінгу білків. Он-лайн інструменти для прогнозу вторинної структури білка по послідовностям. Методи реконструкції просторової структури: моделювання по гомології, конформаційний пошук, молекулярний фітінг. 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 оффлайн ресурси та інструменти. Поняття топології і ключові формати її зберігання.

Ключові програмні пакети (Shrödinger, PyMOL, Molecular Operating Environment (MOE), ICM Pro, CCDC Gold, Modeler, Chimera, Gromacs, тощо). Молекулярні

механізми ліганд-білкової взаємодії і їх наслідки. Інтерпретація молекулярних даних на підставі результатів молекулярного докінгу і молекулярної динаміці. Отримання файлів структурної топології та координат лігандів. Призначення, принцип роботи і можливості он-лайн інструменту ProDRG.

Тема 5. Прогнозування і дослідження ліганд-білкових і макромолекулярних взаємодій. Принцип, механізм, перебудова молекул внаслідок ліганд-білкової взаємодії і їх дослідження за допомогою молекулярного докінгу і молекулярної динаміці. Віртуальний скринінг і молекулярний докінг із використанням карти зв'язування та ролі ефекторів. **(14 год)**

Механізми ліганд-білкових і білок-білкових взаємодій. Типи та механізми молекулярного докінгу. Використання програмного забезпечення для молекулярного докінгу. Алгоритми роботи програмного забезпечення для молекулярного докінгу та скринінгу: AutoDock, GOLD, Schrödinger, FlexX, Glide, CovDock, HEX, DOCK, та ін. Аналіз взаємодій ліганду і молекулярної мішені: PyMOL, BIOVIA DiscoveryStudio, cLigPlus, PLIP (Protein-Ligand Interaction Profiler), PDB2PQR/APBS.

Змістовий модуль 3. Застосування ресурсоемних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач. Моделювання молекулярної динаміки.

Тема 6. Ресурсоемні обчислення в молекулярній біології. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотоківих і багатопотоківих обчислень, використання CPU і GPU обчислень. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Технології Grid і Cloud. Робота з кластером. Застосування кластерних і Грід обчислень для вирішення різноманітних задач молекулярної динаміки (методи, алгоритми, силові поля, умови, тощо): підготовка мікро- та макромолекул, параметризація систем, алгоритми, команди та файли конфігурації. **(14 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.

Тема 7. Засоби кінцевої обробки результатів розрахунку молекулярної динаміки. Порівняння даних результатів молекулярної динаміки з експериментальними даними x-Ray і ЯМР. **(14 год)**

Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів. Gromacs: параметри mdp-файлів. Gromacs: pulling, freeze, ndx. Методи кристалографії та ЯМР. Переваги і обмеження інструментальних методів. Порівняння і взаємне доповнення лабораторних і обчислювальних методів. NOSC та VMD. Порівняння результатів молекулярної динаміки та даних ЯМР.

Тема 8. Хакатон (hackathon): використання методів біоінформатики та структурної біології на прикладі дослідження білків цитоскелету та їх ефекторів. **(2 год)**

**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	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	6
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	6
3	Методи, алгоритми і задачі молекулярної філогенетики. Галузі застосування. Біоінформатична реконструкція, візуалізація та аналіз дендрограмм. Математична і програмна складові кладистичного аналізу.	2	2	8
Разом за змістовим модулем 1		6	6	20
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2 <i>Методи моделювання і аналізу молекулярних структур і міжмолекулярних взаємодій</i>				
4	Ключові репозиторії структур макромолекул і низькомолекулярних сполук. 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	2	2	10

	речовин та біополімерів. Фактор конформації і стереоізомерії лігандів. Бібліотеки фрагментів.			
5	Прогнозування і дослідження ліганд-білкових і макромолекулярних взаємодій. Принцип, механізм, перебудова молекул при молекулярному докінгу або молекулярній динаміці. Молекулярний докінг і віртуальний скринінг із використанням карти зв'язування та ролі ефекторів.	2	2	10
Разом за змістовим модулем 2		4	4	20
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3 <i>Застосування ресурсоемних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач. Моделювання молекулярної динаміки.</i>				
6	Ресурсоемні обчислення в молекулярній біології. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотокових і багатопотокових обчислень, використання CPU і GPU обчислень. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Технології Grid і Cloud. Робота з кластером. 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. 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.	2	2	10
7	Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів. Gromacs: параметри mdp-файлів. Gromacs: pulling, freeze, ndx. 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.	2	2	10
8	Хакатон: використання методів біоінформатики	2		

	та структурної біології на прикладі дослідження білків цитоскелету та їх ефекторів.			
<i>Разом за змістовим модулем 3</i>		6	4	20
ВСЬОГО		16	14	60

Загальний обсяг годин	– 90 годин (<i>3 кредити ECTS</i>), у тому числі:
Лекції	– 16 годин
Лабораторні роботи	– 14 годин
Самостійна робота	– 60 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. 10 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, 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. 6 год.

Рекомендована література

[1, 2, 6, 8]

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. 10 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

[1, 2, 6, 8, 11]

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). **6 год.**

Рекомендована література

[1, 2, 6, 8, 11]

Тема 3. МЕТОДИ, АЛГОРИТМИ І ЗАДАЧІ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ФІЛОГЕНЕТИКИ. ГАЛУЗІ ЗАСТОСУВАННЯ. БІОІНФОРМАТИЧНА РЕКОНСТРУКЦІЯ, ВІЗУАЛІЗАЦІЯ ТА АНАЛІЗ ДЕНДРОГРАММ. МАТЕМАТИЧНА І ПРОГРАМНА СКЛАДОВІ КЛАДИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ. 10 год.

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

Практична робота 3. Практичне застосування методів і програмних інструментів філогенетичного аналізу. Програма MEGA. Реконструкція не вкорінених, вкорінених дерев. Визначення коректної топології і положення коріння. Оцінка результатів кладистичного аналізу. **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

[1, 2, 6, 8, 12]

Питання до змістового модуля 1

1. Визначення обчислювальної біології і біоінформатики.
2. Основні завдання і цілі біоінформатики.
3. Поняття геному та протеому.
4. Поняття геноміки та протеоміки.
5. Біоінформатичні Web-ресурси. PIR. NCBI. Swiss-Prot. Protein Data Bank.
6. Види баз даних. Ключові біоінформатичні бази даних: GenBank/EMBL/DDBJ, UniProtKB, RCSB Protein Data Bank. PubMed.
7. Основи пошуку біологічної інформації.
8. Інтегровані пошукові системи NCBI і UniProt Consortium.
9. IUPAC. Формати *fasta і RAW.
10. Методи біоінформатичного порівняння біологічних послідовностей.
11. Локальні і глобальні вирівнювання.
12. Вагові матриці і їх застосування.
13. Парні, множинні та профільні вирівнювання.
14. Біоінформатичний 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-інтроної 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. Поняття домену білку.
26. Поняття доменного складу та доменної архітектури.
27. Способи біоінформатичного визначення доменів і доменного складу білку.
28. SMART. Pfam. PROSITE. Профілі. Приховані моделі Маркова (HMM).
29. Кладистичні методи біоінформатики. 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 СПОЛУК. 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. 14 год.

Лекція 4. РЕКОНСТРУКЦІЯ ПРОСТОРОВОЇ СТРУКТУРИ СТРУКТУР МІКРО- ТА МАКРОМОЛЕКУЛЯРНИХ СТРУКТУР. ФОРМАТИ ЗАПИСУ СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ. ПРЕПРОЦЕСІНГ ХІМІЧНИХ ТА СТРУКТУРНО-БІОЛОГІЧНИХ БАЗ ДАНИХ. 2 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..10 год.

Рекомендована література

[1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 13]

Тема 5. ПЕРЕДБАЧЕННЯ ЛІГАНД-БІЛКОВИХ І МАКРОМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ. ПРИНЦИП, МЕХАНІЗМ, ПЕРЕБУДОВА МОЛЕКУЛ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНОМУ ДОКІНГУ АБО МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИНАМІЦІ. ВІРТУАЛЬНИЙ СКРИНІНГ І МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДОКІНГ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ КАРТИ ЗВ'ЯЗУВАННЯ ТА РОЛІ ЕФЕКТОРІВ.

Лекція 5. ПЕРЕДБАЧЕННЯ ЛІГАНД-БІЛКОВИХ І БЛОК-БІЛКОВИХ ВЗАЄМОДІЙ. ТИПИ ТА АЛГОРИТМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ. ВИКОРИСТАННЯ ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО

ДОКІНГУ. АЛГОРИТМИ І ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ СКРИНІНГУ ТА МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ. 2 год.

Практична робота 5. Молекулярний докінг і віртуальний скринінг. Використання карт зв'язування лігандів та дослідження ролі ефекторів. *2 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. *5 год.*

Завдання для самостійної роботи: Програми для молекулярного докінгу лігандів і білок-білкових взаємодій. Алгоритми молекулярного докінгу засобами програм Autodock, GOLD, Schrödinger (Glide), HEX, DOCK, FlexX, zDock, eHits, Gramm, Surflex-Dock та ін. *5 год.*

Рекомендована література

[3, 4, 5, 7, 8, 13, 14]

Питання до змістового модуля 2

1. Принципи і програми візуалізації структури молекул.
2. Моделювання структури низькомолекулярних речовин.
3. Молекулярна механіка і молекулярна динаміка.
4. Силкові 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

Молекулярна динаміка та проблеми ресурсоемних обчислювань

Тема 6. РЕСУРСОЄМНІ ОБЧИСЛЕННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ БІОЛОГІЇ. ОПТИМІЗАЦІЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ РЕСУРСІВ, ПЕРЕВАГИ ОДНОПОТОКОВИХ І БАГАТОПОТОКОВИХ ОБЧИСЛЕНЬ, ВИКОРИСТАННЯ CPU І GPU ОБЧИСЛЕНЬ. СПЕЦІАЛІЗОВАНІ СЕРВІСИ, ВІРТУАЛЬНІ ОРГАНІЗАЦІЇ, ВИКОРИСТАННЯ ВІДДАЛЕНОГО І СПІЛЬНОГО ДОСТУПУ. ТЕХНОЛОГІЇ GRID І CLOUD. РОБОТА З КЛАСТЕРОМ. 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. **14 год**

Лекція 6. РЕСУРСОЄМНІ ОБЧИСЛЕННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ БІОЛОГІЇ. ВИКОРИСТАННЯ CPU І GPU ОБЧИСЛЕНЬ. МЕТОДИ ВІДДАЛЕНОГО ДОСТУПУ. КЛАСТЕРНІ ОБЧИСЛЕННЯ. ТИПИ, МЕТОДИ, АЛГОРИТМИ ТА ПРОТОКОЛИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. **2 год.**

Практична робота 6. Молекулярна динаміка основана на силових полях: особливості підготовка мікро- та макромолекул до молекулярної динаміки, алгоритми команд та файли конфігурації. **2 год.**

Завдання для самостійної роботи: Типи ресурсоемних обчислень. Апаратна і програмна складові під час обрахунку молекулярної динаміки і їх вплив на якість і швидкість ресурсоемних обчислень. Використання CUDA. **5 год.**

Рекомендована література

[3, 4, 15]

Завдання для самостійної роботи: Рівноважна та не рівноважна молекулярна динаміка. Методи аналізу розрахунку не рівноважної молекулярної динаміки. Технології Grid і Cloud. Основи та алгоритми молекулярної динаміки. Програми для моделювання молекулярної динаміки. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів і макромолекулярних комплексів. **5 год.**

Рекомендована література

[3, 4, 15]

Тема 7. ЗАСОБИ АНАЛІЗУ І ОБРОБКИ РЕЗУЛЬТАТІВ РОЗРАХУНКУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. ОБМЕЖЕННЯ І ПЕРЕВАГИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ І ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ МЕТОДІВ. ПОРІВНЯННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ І ДАНИХ X-RAY І ЯМР. **14 год**

Лекція 7. АНАЛІЗ І ОБРОБКА РЕЗУЛЬТАТІВ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ. ПОРІВНЯННЯ ДАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ З ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИМИ ДАНИМИ X-RAY І ЯМР. **2 год.**

Практична робота 7. Підготовка систем і запуск обрахунку 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. *5 год.*

Рекомендована література

[3, 4, 5, 8, 15]

Завдання для самостійної роботи: Обробка результатів розрахунку молекулярної динаміки. Програми NОС та VMD. Методи кристалографії та ЯМР. Обмеження і переваги експериментальних і обчислювальних методів. *5 год.*

Рекомендована література

[3, 4, 5, 8, 15]

Тема 8. ХАКАТОН: ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ БІОІНФОРМАТИКИ ТА СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЇ НА ПРИКЛАДІ ДОСЛІДЖЕННЯ БІЛКІВ ЦИТОСКЕЛЕТУ ТА ЇХ ЕФЕКТОРІВ. 2 год.

Лекція 8. ХАКАТОН: ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ БІОІНФОРМАТИКИ ТА СТРУКТУРНОЇ БІОЛОГІЇ НА ПРИКЛАДІ ДОСЛІДЖЕННЯ БІЛКІВ ЦИТОСКЕЛЕТУ ТА ЇХ ЕФЕКТОРІВ. 2 год

Рекомендована література

[4, 5]

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 NОС 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 дерев. Визначення топології і алгоритми.
30. Види філогенетичних дерев.
31. Програмне забезпечення: PYLIP, ClustalX, MEGA.
32. Вбудовані в Clustal інструменти кластеризації послідовностей.
33. Ключові репозиторії структурних файлів макромолекул і низькомолекулярних сполук. Бібліотеки фрагментів.
34. Реконструкція просторової структури низькомолекулярних речовин, макромолекул та їх комплексів de novo.
35. Фундаментальні принципи і програми для візуалізації молекулярних даних.
36. Джерела інформації о структурі молекул, ключові формати запису і зберігання.
37. Конформаційна мінливість і стереоізомерії лігандів.
38. Силові поля. Препроцесінг хімічних та структурно-біологічних даних.
39. Рівні організації білку.
40. Методи реконструкції просторової структури біополімерів
41. Modeler, ICM, Gaussian, Chimera.
42. Взаємодія білків з низькомолекулярними речовинами.

- Реконструкція ліганд-білкових комплексів.
43. Молекулярні механізми ліганд-білкової взаємодії і їх наслідки.
 44. Інтерпретація молекулярних даних на підставі результатів молекулярного докінгу і молекулярної динаміки.
 45. Отримання файлів структурної топології та координат лігандів. Призначення, принцип роботи і можливості он-лайн інструменту
 46. Механізми ліганд-білкових і білок-білкових взаємодій.
 47. Типи та механізми молекулярного докінгу.
 48. Білок-білкові взаємодії.
 49. Використання програмного забезпечення для молекулярного докінгу.
 50. Алгоритми роботи програмного забезпечення для скринінгу та молекулярного докінгу: AutoDock, GOLD, FlexX, Glide, CovDock, HEX, DOCK, та ін.
 51. Ресурсоємні обчислення в молекулярній біології. Застосування ресурсоємних обчислень для вирішення молекулярно-біологічних задач.
 52. Оптимізація обчислювальних ресурсів, переваги однопотоківих і багатопотоківих обчислень, використання CPU і GPU обчислень.
 53. Технології Grid і Cloud.
 54. Спеціалізовані сервіси, віртуальні організації, використання віддаленого і спільного доступу. Grid.
 55. Робота з кластером. Застосування кластерних і Грід обчислень для вирішення різноманітних задач молекулярної динаміки.
 56. Основи молекулярної динаміки білків та полінуклеотидів.
 57. Вирішення задач молекулярної динаміки: підготовка, параметризація систем, алгоритми команд, файли конфігурації.
 58. Методи аналізу результатів розрахунку молекулярної динаміки.
 59. Gromacs: pulling, freeze, ndx.
 60. Довготривала молекулярна динаміка білків, лігандів, макромолекулярних комплексів.
 61. Поетапна постановка задач структурних обчислень і робота з кластером. Локальна і дистанційна робота з кластером.
 62. Обробка результатів розрахунку молекулярної динаміки.
 63. Апаратна і програмна складові під час обрахунку молекулярної динаміки і їх вплив на якість і швидкість ресурсоємних обчислень.
 64. Методи кристалографії та ЯМР. Переваги і обмеження інструментальних методів.
 65. Порівняння і взаємне доповнення лабораторних і обчислювальних методів структурної біоінформатики. NOC та VMD.
 66. 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 студентами навчального матеріалу. Форма проведення поточного контролю під час навчальних занять: усне опитування, письмовий контроль, тестовий, самооцінювання, перевірка практичних навичок. Максимальна кількість балів, яку студент 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 студента, 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 2,85

	ЗМ1		ЗМ2		ЗМ3	
	<i>Min. – 20 бали</i>	<i>Max. – 33 бали</i>	<i>Min. – 20 балів</i>	<i>Max. – 33 бали</i>	<i>Min. – 20 балів</i>	<i>Max. – 34 бали</i>
Усна відповідь	„3” x 3 = 9	„5” x 3 = 15	„3” x 2 = 6	„5” x 2 = 10	„3” x 2 = 6	„5” x 2 = 10
Домашнє самостійне завдання	„1” x 3 = 3	„2” x 3 = 6	„1” x 2 = 2	„2” x 2 = 4	„1” x 2 = 2	„2” x 2 = 4
Модульна контрольна робота	8	12	12	19	12	20

³⁶ – мінімальна/максимальна оцінка, яку може отримати студент.
¹ – мінімальна/максимальна залікова кількість робіт чи завдань.

Для студентів, 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	20	20	20	60
Максимум	33	33	34	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 студента при написанні модульної контрольної роботи з поважних причин, які підтверджені документально, він має право на написання такої роботи впродовж двох тижнів. При неявці студента 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)
82 – 89	B	добре (Good)
74 – 81	C	
64 – 73	D	
60 – 63	E	задовільно (Satisfactory)
35 – 59	FX	незадовільно (Fail) з можливістю повторного складання
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. Claverie J.-M. and C. Noterdame. *Bioinformatics for Dummies*. Wiley Publishing. – 2007. – 452p.
2. Mount D.W. *Bioinformatics Sequence and genome analysis* -2003.– 564.
3. *Drug Design: Structure- and Ligand-Based Approaches*. Ed.: Merz K.M., Ringe D., Reynolds C.H. Cambridge University Press; 1st ed., 2010, (ISBN-10 : 0521887232; ISBN-13 : 978-0521887236). 286 p.
4. Bourne, P.E., and Gu, J. *Structural Bioinformatics* (2nd edition), John Wiley & Sons, New York, 2009. – 1035p.
5. Bourne P. E., Weissig H. *Structural Bioinformatics*. – Hoboken: Wiley-Liss, 2003 – 649 p.
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, 2008 https://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/doc/format_descriptions/Format_v32_letter.pdf
8. Higgins D. and W. Taylor. *Bioinformatics. Sequence, structure and databanks*. OXFORD university press. -2000. - 249p.

Додаткова література

1. Karpov P.A., Blume Ya.B. Bioinformatic search for plant homologues of animal structural MAPs in the Arabidopsis thaliana genome. In the: *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.
2. 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
3. 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>
4. 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>
5. Chudinova EM, Karpov PA, Fokin AI, Yemets AI, Lytvyn DI, Nadezhdina ES, Blume YB. MAST-like protein kinase IREH1 from Arabidopsis thaliana co-localizes

with the centrosome when expressed in animal cells. *Planta*. 2017 Nov;246(5):959-969. doi: 10.1007/s00425-017-2742-4. Epub 2017 Jul 17. PMID: 28717875.

6. Demchuk, O.M., Karpov, P.A. & Blume, Y.B. Docking small ligands to molecule of the plant FtsZ protein: Application of the CUDA technology for faster computations. *Cytol. Genet.* 46, 172–179 (2012). <https://doi.org/10.3103/S0095452712030048>

7. 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>.

8. Rayevsky A., Samofalova D., Ishchenko L., Vygovska L., Mazur V., Labudzynski 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.

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>

Розділи у монографіях:

1. 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/>
2. Karpov P.A., Blume Y.B: Bioinformatic search for plant homologues of animal structural MAPs in the. *The Plant Cytoskeleton: a Key Tool for Agro-Biotechnology*, 10/2008: chapter 18: pages 373-397; Springer, Netherlands., ISBN: 978-1-4020-8843-8
3. 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
4. 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
 5. 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