



Біоінформаційні бази даних

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Галузь знань	16 – Хімічна та біоінженерія
Спеціальність	162 Біотехнології та біоінженерія
Освітня програма	ОНП Біотехнології
Статус дисципліни	вибіркова
Форма навчання	Денна
Рік підготовки, семестр	2 курс, осінній семестр
Обсяг дисципліни	Загальна кількість 150 год., в т.ч. лекції – 18 годин; практичні – 18 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Іспит/МКР
Розклад занять	Лекції: 1 год./тиждень; практичні: 1 год./тиждень згідно розкладу
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: к.т.н., асистент Дем'яненко Ірина Володимирівна, iryna.demjanenko@gmail.com Практичні: к.т.н., асистент Дем'яненко Ірина Володимирівна, iryna.demjanenko@gmail.com
Розміщення курсу	Матеріали курсу розміщені в Електронному Кампусі та на платформі Сікорський Дистанс

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

У цьому курсі відбувається практичне ознайомлення та вивчення методів роботи з найважливішими біоінформаційними базами даних. В результаті створення перших біоінформаційних баз даних (БІБД) нуклеотидних і амінокислотних послідовностей було вирішено питання зберігання, поповнення та забезпечення доступу до БІБД розшифрованих білків, ДНК та РНК, а також їх обробки. Однак, розвиток геноміки та протеоміки став неможливий також без використання сучасних обчислювальних технологій – методів молекулярної динаміки, обчислювальної математики і статистики. Це дало змогу співставляти дані та на основі їх аналізу формувати теоретичні припущення та перевіряти їх дослідним шляхом і, таким чином, отримувати нову інформацію.

Тому велику роль у розвитку біоінформатики мають БІБД нуклеотидних та амінокислотних послідовностей не лише як бібліотека даних молекулярної біології, але й ефективні інструменти для різнобічного аналізу цих даних, вбудовані в сайти відомих БІБД, які дають змогу порівнювати подібні послідовності або цілі геноми, розробляти системи візуалізації біополімерних макромолекул для аналізу взаємозв'язків між окремими атомами та пошуку мішеней для дії ліків, моделювати просторову структуру біополімерів і шукати подібність структур тощо. З огляду на це, дисципліна «Практичне застосування біоінформаційних баз даних», безперечно, є важливою та актуальною для підготовки сучасних спеціалістів біотехнологів.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей: використання інформаційних і комунікаційних технологій; вчитися і оволодівати сучасними знаннями; комплексно аналізувати біологічні та біотехнологічні процеси на молекулярному та клітинному рівнях; використовувати знання про шляхи біосинтезу практично цінних метаболітів для вдосконалення біотехнологій їх одержання; вивчення принципів роботи та визначення можливостей

використання біоінформаційних методів аналізу порівняння складу, структури та властивостей і взаємодії різних біологічних молекул; використовувати сучасні інформаційні та обчислювальні технології для підтримки і оновлення баз даних молекулярної біології.

Основні завдання навчальної дисципліни

Основним завданням дисципліни є формування у здобувачів вищої освіти наступних компетентостей:

Загальні компетентності:

1. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні
2. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел

Фахові компетентності:

1. Здатність здійснювати пошук необхідної інформації в науковій і технічній літературі, базах даних та інших джерелах.
2. Здатність відбирати та аналізувати релевантні дані, у тому числі за допомогою сучасних методів аналізу даних і спеціального програмного забезпечення.
3. Здатність розробляти нові біотехнологічні об'єкти і технології та підвищувати ефективність існуючих технологій на основі експериментальних та/або теоретичних досліджень та/або комп'ютерного моделювання.
4. Здатність застосовувати сучасні методи системного аналізу для дослідження та створення ефективних біотехнологічних процесів.

Програмні результати навчання:

- Знати вітчизняне та міжнародне законодавство у сфері авторського права. Вміти захищати свою інтелектуальну власність та уникати порушень інтелектуальної власності інших осіб.
- Знати молекулярну організацію та регуляцію експресії генів, реплікації, рекомбінації та репарації, рестрикції та модифікації генетичного матеріалу у про- та еукаріотів, стратегію створення рекомбінантних ДНК для цілеспрямованого конструювання біологічних агентів.
- Упроваджувати найбільш ефективні біотехнологічні методи та прийоми у практичну виробничу діяльність на основі оцінки ефективності передових біотехнологій та врахування загальних тенденцій розвитку новітніх біотехнологій у провідних країнах.
- Вільно спілкуватися усно і письмово державною та іноземною мовами, обговорювати з фахівцями і нефхівцями результати досліджень, інновації та/або управління виробництвом і біотехнології.
- Знаходити необхідну інформацію у науковій та довідниковій літературі, електронних базах, інших джерелах інформації, оцінювати її релевантність та достовірність.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Місце в структурно-логічній схемі навчання забезпечується дисциплінами, що вивчалися на попередніх семестрах: «Проблемні питання сучасної біотехнології», «Системний аналіз біотехнологічних об'єктів», «Прикладна біоінформатики» а також базовий рівень володіння англійською мовою не нижче А2. У структурно-логічній площині програми підготовки магістрів науковців з біотехнології дисципліна базується на попередньо вивчених дисциплінах, які створюють фундамент для подальшої дослідницької і практичної діяльності випускників.

Вивчення дисципліни допоможе студентам при написанні магістерської дисертації

3. Зміст навчальної дисципліни

Лекція 1. Поняття про бази даних: їх структура, класифікація

Лекція 2. Бази даних ДНК та РНК

Лекція 3-4. Бази даних білків

Лекція 5. Бази даних метаболічних шляхів.

Лекція 6. Спеціалізовані бази даних

Лекція 7. Бази даних з біології людини.

Тема 2. Практичне застосування біоінформатичних баз даних

Лекція 8. Молекулярне моделювання

Лекція 9. Молекулярний докінг.

Надається перелік розділів і тем всієї дисципліни.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Горобець, С. В. Основи біоінформатики [Електронний ресурс]: підручник для студентів напряму підготовки 6.051401 «Промислова біотехнологія» факультету біотехнології і біотехніки / С. В. Горобець, О. Ю. Горобець, Т. А. Хоменко ; НТУУ «КПІ». - Електронні текстові дані (1 файл: 2,72 Мбайт). – Київ : НТУУ «КПІ», 2010
2. Основи біоінформатики. Бази даних молекулярної біології. Практикум / Укладачі: Горобець С.В., Горобець О.Ю., Лень Т.С. – К.:ВПК “Політехніка”, 2009. – 68 с.
3. Горобець С. В. Біоінформатика. Практикум [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності 162 «Біотехнології та біоінженерія» / С. В. Горобець, О. Ю. Горобець, І.В. Дем'яненко; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл 5.49 Мбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. – 86с. <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/38813>
4. Горобець С. В. Біоінформатичні бази даних [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 162 «Біотехнології та біоінженерія» / С. В. Горобець, О. Ю. Горобець, М. О. Булаєвська ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,86 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. – 117 с. <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/36457>

Інформаційні ресурси

1. <https://www.genomicepidemiology.org/>
2. **EPD** - Eukaryotic Promoter Database
Адреса: <http://www.epd.isb-sib.ch/>
3. **ooTFD** - object oriented Transcription Factors Database
Адреса: <http://www.ifti.org/>
4. **PLACE** - PLAnt Cis-acting regulatory DNA Elements database
Адреса: <http://www.dna.affrc.go.jp/htdocs/PLACE/>
5. **RegulonDB** - A Database on Transcriptional Regulation and Genome Organization
Адреса: http://www.cifn.unam.mx/Computational_Genomics/regulondb/
6. **TRANSFAC** - eucaryotic trans-acting Transcriptional regulatory Factors and cis-acting regulatory sites database
Адреса: <http://www.gene-regulation.com/pub/databases.html>
7. **EID** - the Exon-Intron Database
Адреса: <http://hsc.utoledo.edu/bioinfo/eid/>
8. **TransTerm** - Translational Termination signal database
Адреса: <http://mrna.otago.ac.nz/Transterm.html>
9. **HOVERGEN** - HOmologous VERtebrate GENs database
Адреса: <http://pbil.univ-lyon1.fr/databases/hovergen.html>
10. **UniGene**
Адреса: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=unigene>
11. **WANDA** - A database of duplicated genes in fish
Адреса: <http://www.evolutionsbiologie.uni-konstanz.de/Wanda/>
12. **RefSeq (LocusLink)** - Reference Sequence standards database
Адреса: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/RefSeq/>
13. **tRNA** - database of tRNA sequences

- Адреса: <http://trna.bioinf.uni-leipzig.de/DataOutput/>
14. **genomic tRNA database**
Адреса: <http://gtrnadb.ucsc.edu/>
 15. **5S rRNA - 5S ribosomal RNAs database**
Адреса: <http://rose.man.poznan.pl/5SData/Main.html>
<http://biobases.ibch.poznan.pl/5SData/Main.html>
 16. **SILVA databases**
Адреса: <http://www.arb-silva.de>
 17. **OWL - Composite Protein Sequence Database**
Адреса: <http://bioinf.man.ac.uk/dbbrowser/OWL/>
 18. **PIR - Protein Information Resource**
Адреса: <http://www-nbrf.georgetown.edu/>
<http://pir.georgetown.edu/>
 19. **SWISS-PROT - the protein sequence data bank**
Адреса: <http://www.ebi.ac.uk/swissprot/><http://www.expasy.ch/sprot/>
 20. **trEMBL - EMBL protein-coding DNA sequence features translated into peptide sequences**
Адреса: <http://www.expasy.ch/sprot>
 21. **DSSP - Dictionary of Secondary Structure of Proteins**
Адреса: <http://swift.cmbi.ru.nl/gv/dssp/>
 22. **HSSP - Homology-derived Secondary Structure of Proteins**
Адреса: <http://swift.cmbi.ru.nl/gv/hssp/>
 23. **InterPro - an integrated documentation resource for protein families, domains and functional sites**
Адреса: <http://www.ebi.ac.uk/interpro/>
 24. **DIP - Database of Interacting Proteins**
Адреса: <http://dip.doe-mbi.ucla.edu/>
 25. **BioImage - Biological Images for scientific research**
Адреса: <http://www.bioimage.org>
 26. **BioMagResBank [BMRB] - repository for data from NMR on proteins, peptides, and nucleic acids**
Адреса: <http://www.bmrwisc.edu/>
 27. **CSD - the Cambridge Structural Database**
Адреса: <http://www.ccdc.cam.ac.uk>
 28. **GTOP - Genomes TO Protein structures and functions**
Адреса: <http://spock.genes.nig.ac.jp/~genome/gtop.html>
 29. **MMDB - Molecular Modelling DataBase**
Адреса: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/MMDB/mmdb.shtml>
 30. **MSD - Macromolecular Structure Database**
Адреса: <http://msd.ebi.ac.uk/index.html>
 31. **NDB - Nucleic acid DataBank**
Адреса: <http://ndbserver.rutgers.edu/>
 32. **PDB - Brookhaven Protein DataBank**
Адреса: <http://www.rcsb.org/pdb/>
 33. **DOMO - protein domain database**
Адреса: <http://abcis.cbs.cnrs.fr/domo/>
 34. **InterPro - an integrated documentation resource for protein families, domains and functional sites**
Адреса: <http://www.ebi.ac.uk/interpro/>
 35. **SBASE - protein domain library**
Адреса: <http://www.icgeb.trieste.it/sbase/>
 36. **Blocks - most highly conserved regions of proteins**
Адреса: <http://blocks.fhcrc.org/>
 37. **PROSITE - PROtein SITEs and patterns dictionary**
Адреса: <http://www.expasy.ch/prosite/>
 38. **The Homeodomain Resource**
Адреса: <http://research.nhgri.nih.gov/homeodomain/>
 39. **AARSDB - AminoAcyl-tRNASynthetases DataBase**

- Адреса: <http://biobases.ibch.poznan.pl/aars/>
40. **BRENDA** - enzyme database
Адреса: <http://www.brenda-enzymes.info/>
 41. **ENZYME** - ENZYME nomenclature database
Адреса: <http://www.expasy.ch/enzyme/>
 42. **Klotho** - biochemical compounds declarative database
Адреса: <http://www.biocheminfo.org>
 43. **LIGAND** - LIGAND chemical database for enzyme reactions
Адреса: <http://www.genome.ad.jp/dbget/ligand.html>
 44. **MEROPS** - Peptidase database
Адреса: <http://www.merops.co.uk>
 45. **Rebase** - Restriction Enzyme dataBASE
Адреса: <http://rebase.neb.com/rebase/rebase.html>
 46. **RNase P Database** - the RiboNuclease P Database
Адреса: <http://www.mbio.ncsu.edu/RNaseP/home.html>
 47. **BioCyc** - BioCyc Database collection
Адреса: <http://biocyc.org/>
 48. **EcoCyc** - Encyclopedia of E.coli Genes and Metabolism
Адреса: <http://www.ecocyc.org/>
 49. **KEGG** - Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes
Адреса: <http://www.genome.ad.jp/kegg/>
 50. **SoyBase** - Soybean metabolism dataBase
Адреса: <http://soybase.agron.iastate.edu/>
 51. **SPAD** - Signaling PATHway Database
Адреса: <http://www.grt.kyushu-u.ac.jp/spad/>
 52. **ARTICLE@INIST** - INIST catalog of Articles and Monographs
Адреса: <http://services.inist.fr/>
 53. **MedLine**
Адреса: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=pubmed>
<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?db=PMC>
 54. **HvrBase** - primates mtDNA control region sequences compilation
Адреса: <http://www.hvrbase.de/>
 55. **MITOMAP** - human mitochondrial genome database
Адреса: <http://www.mitomap.org/>
 56. **GeneNet** - a Gene Network database
Адреса: genenetwork.org/webqtl/main.py
 57. **CyanoMutants**
Адреса: <http://www.kazusa.or.jp/cyano/mutants/>
 58. **HIV Molecular Immunology Database**
Адреса: <http://www.hiv.lanl.gov/content/immunology/index.html>
 59. **IEDB** - Immune Epitope DataBase
Адреса: <http://www.immuneepitope.org/>
 60. **Kabat** - Kabat database of sequences of proteins of immunological interest
Адреса: <http://www.kabatdatabase.com/>
 61. **MTB** - Mouse Tumor Biology database
Адреса: <http://tumor.informatics.jax.org/>
 62. **OMIA** - On-line Mendelian Inheritance in Animals
Адреса: <http://omia.angis.org.au/home/>
 63. **OMIM** - On-line Mendelian Inheritance in Man
Адреса: <http://www.omim.org/>
 64. **TTD** - Therapeutic Target Database
Адреса: <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
 65. **AtDB(TAIR)** - Arabidopsis thaliana DataBase
Адреса: <http://www.arabidopsis.org>
 66. **BioKnowledge Library**

- Адреса: <http://www.proteome.com>
67. **CyanoBase - the genome dataBase for Cyanobacteria**
Адреса: <http://www.kazusa.or.jp/cyano/>
 68. **EcoCyc - Encyclopedia of E.coli Genes and Metabolism**
Адреса: <http://www.ecocyc.org/>
 69. **ExpressDB (EXD)**
Адреса: <http://arep.med.harvard.edu/ExpressDB/>
 70. **FlyBase - A Database of the Drosophila Genome**
Адреса: <http://flybase.org/>
 71. **FULL-Malaria - a database for a full-length enriched cDNA library from human malaria parasite, Plasmodium falciparum**
Адреса: <http://fullmal.hgc.jp/docs/lifecycle.html>
 72. **GeneDB**
Адреса: <http://www.genedb.org/>
 73. **HUMBIO - NUMan BIOology database**
Адреса: <http://obi.img.ras.ru/>
 74. **MATDB - MIPS Arabidopsis Thaliana DataBase**
Адреса: <http://mips.helmholtz-muenchen.de/plant/athal/>
 75. **MGI - Mouse Genome Informatics**
Адреса: <http://www.informatics.jax.org/mgihome/>
 76. **PlasmoDB - an integrative database of the Plasmodium falciparum genome**
Адреса: <http://PlasmoDB.org>
 77. **RegulonDB - A Database on Transcriptional Regulation and Genome Organization**
Адреса: www.cifn.unam.mx/Computational_Genomics/regulondb/
 78. **RGD - Rat Genome Database**
Адреса: <http://rgd.mcw.edu/>
 79. **SGD - Saccharomyces Genome Database**
Адреса: <http://www.yeastgenome.org/>
 80. **WormBase**
Адреса: <http://www.wormbase.org>
 81. **ZFIN - The Zebrafish Information Network**
Адреса: <http://zfin.org>
 82. **GENATLAS**
Адреса: <http://www.dsi.univ-paris5.fr/genatlas/>
 83. **GeneCards - encyclopedia for genes, proteins and diseases**
Адреса: <http://www.genecards.org/>
 84. **HGMD - Human Gene Mutation Database**
Адреса: <http://www.hgmd.org/>
 85. **HGNC - The HUGO Gene Nomenclature Committee Database**
Адреса: <http://www.genenames.org/>
 86. **MITOMAP - human mitochondrial genome database**
Адреса: <http://www.mitomap.org/>
 87. **BSD - Biodegradative Strain Database**
Адреса: <http://bsd.cme.msu.edu/>
 88. **UM-BBD - University of Minnesota Biocatalysis/Biodegradation Database**
Адреса: <http://umbbd.ethz.ch/>
 89. **PRIDE - Proteomics Identifications Database**
Адреса: <http://www.ebi.ac.uk/pride/archive/>
 90. **MitoMiner**
Адреса: <http://mitominer.mrc-mbu.cam.ac.uk>
 91. **GelMap**
Адреса: <https://gelmap.de/>
 92. **ModBase**
Адреса: <http://modbase.compbio.ucsf.edu>
 93. **Enzyme Portal**

- Адреса:<http://www.ebi.ac.uk/enzymeportal/>
94. **Pathway Commons**
Адреса:<http://www.pathwaycommons.org>
95. **Swiss-Model**
Адреса:<http://www.swissmodel.expasy.org>
96. **PATRIC**
Адреса:<http://www.patric.vbi.vt.edu>
97. **Small Molecule Pathway Database**
Адреса:<http://www.smpdb.ca>
98. **Immune Epitope Database**
<http://www.iedb.org>
99. **Ligand Expo**
<http://www.ligand-expo.rcsb.or>
100. **The Cancer Genome Atlas**
<https://www.cancer.gov/about-nci/organization/ccg/research/structural-genomics/tcga>
101. **Clinvar**
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/clinvar/>
102. **Jalview**
<https://www.jalview.org/>
102. Protein Plus online platform <https://proteins.plus/help/tutorial>

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

1	2
	Тема 1. Біоінформатичні бази даних
1	<p>Лекція 1. Поняття про бази даних: їх структура, класифікація</p> <p>Визначення біоінформаційних баз даних, їх місце і роль в молекулярній біології. Історія виникнення, найбільш відомі організації – куратори БІБД і створені ними банки даних. Застосування БІБД в різних областях молекулярної біології, основні операції, що виконуються. Класифікація БІБД, основні бази даних, включаючи бази даних по наукових виданнях з молекулярної біології та медицини, бази даних по нуклеотидних та білкових послідовностях, структурі білків, повних геномах, таксономії та ін.</p> <p>Література: базова[1,4]</p>
2	<p>Лекція 2. Бази даних ДНК та РНК</p> <p>Загальна характеристика БД сплайсінга (EID), трансляції (TransTerm), вирівнювання (HOVERGEN, UniGene, WANDA). Загальна характеристика БД мРНК (RefSeq), БД тРНК (tRNA, genomic tRNA database), БД рРНК (5S rRNA, RISSC, SILVA database).</p> <p>Література: базова[1,4], інформаційні джерела [6-15]</p>
3	<p>Лекція 3. Бази даних білків</p> <p>Загальна характеристика БД білків 1D структури (OWL, PIR, SWISS-PROT, trEMBL), БД білків 2D структури (DSSP, HSSP, InterPro), БД білків 3D структури (BioImage, BioMagResBank, CSD, GTOP, MMDB, MSD, NDB, PDB).</p> <p>Література: базова[1,4], інформаційні джерела [16-31]</p>
4	<p>Лекція 4. Бази даних білків</p> <p>БД білкових доменів (DOMO, InterPro, SBASE), БД білкових мотивів (Blocks, PROSITE, The Homeodomain Resource), БД взаємозв'язків білків (DIP), БД ферментів (AARSDB, BRENDA, ENZYME, Klotho, LIGAND, MEROPS, Rebase, RNase P Database), БД експресії білків (GEO).</p> <p>Література: базова[1,4], інформаційні джерела [32-45]</p>
5	<p>Лекція 5. Бази даних метаболічних шляхів.</p> <p>Загальна характеристика БД метаболічних шляхів (BioCyc, EcoCyc, KEGG, SoyBase, SPAD)</p>

	Література: базова[1,4], інформаційні джерела [46-50]
6	Лекція 6. Спеціалізовані бази даних Загальна характеристика бібліографічні БД (ARTICLE@INIST, MedLine), БД мітохондріальних геномів (HvrBase, MITOMAP), БД генетичних карт (GeneNet), БД мутацій (CyanoMutants), БД з біомедицини (HIV Molecular Immunology Database, IEDB, Kabat, MТВ, OMIA, OMIM, TTP), БД окремих організмів (AtDB, BioKnowledge Library, CyanoBase, EcoCyc, ExpressDB, FlyBase, FULL-Malaria, GeneDB, HUMBIO, MANDB, MGI, PlasmDB, RegulonDB, RGD, SGD, WormBase, ZFIN) Література: базова [1,4], інформаційні джерела [51-80]
7	Лекція 7. Бази даних з біології людини. Загальна характеристика баз даних з біології людини (GENATLAS, GeneCard, HGMD, HGNC, MITOMAP) Література: базова[1,4], інформаційні джерела [81-101]
	<i>Тема 2. Практичне застосування біоінформатичних баз даних</i>
8	Лекція 8. Молекулярне моделювання. Історія становлення методів молекулярного моделювання. Силкові поля, що використовують в молекулярному моделюванні. Програми для молекулярного моделювання Література: базова[4]
9	Лекція 9. Молекулярний докінг. Принцип методу молекулярного докінгу. Сфери його застосування та використання його в фармації. Література: базова [4]

Практичні заняття

Основні завдання циклу практичних занять:

- робота з програмними пакетами, які використовуються в біотехнології;
- практична робота з сучасними базами даних молекулярної біології.

1.	2
1.	Практична робота 1 Робота в базі даних Center for Genomic Epidemiology Література: інформаційне джерело [1]
2.	Практична робота 2 Робота в базах даних ДНК та РНК Література: базова [1,4], інформаційні джерела [6-15]
3.	Практична робота 3 Робота в базах даних білків Література: базова [1,4], інформаційні джерела [6-15]
4.	Практична робота 4 Робота в базах даних метаболічних шляхів. Література: базова [1-4], інформаційні джерела [46-50]
5.	Практична робота 5 Робота в спеціалізованих базах даних Література: інформаційні джерела [51-80]
6.	Практична робота 6 Основи роботи з Proteins Plus. Перевірка кристалічної структури для стикування Література: інформаційні джерела [102]
7.	Практична робота 7

	<p>Основи роботи з Proteins Plus</p> <p>Визначення білок-білкової взаємодії чи кристалічного артефакту</p> <p>Література: інформаційні джерела [102]</p>
8.	<p>Практична робота 8</p> <p>Основи роботи з Proteins Plus</p> <p>Визначення білок-білкової взаємодії чи кристалічного артефакту</p> <p>Література: інформаційні джерела [102]</p>
9.	<p>Практична робота 9.</p> <p>Модульна контрольна робота</p>

6. Самостійна робота студента/аспіранта

Самостійна робота студента по дисципліні включає підготовку до аудиторних занять (27 годин), написання 1 експрес-тесту (3 години) модульної контрольної (4 години), підготовка до екзамену (30 годин) та вивчення певних тем самостійно (50 години).

В якості самостійної роботи обрано підготовку до аудиторних занять за наступними темами:

№	СРС	Кількість годин
1	Архітектура біоінформатичних баз даних	10
2	Статистика накопичення інформації в найбільших базах даних	10
3	Дати характеристику українським науково-дослідним інститутам, які займаються біоінформатикою.	10
4	Силкові поля для вирішення задач молекулярної біології	10
5	Використання сучасних методів драг дезайні в українській фармацевтичній галузі	10

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Вивчення дисципліни «Біоінформатичні бази даних» відбувається на лекційних та практичних заняттях. Наочність навчальних занять забезпечується використанням значної кількості ілюстративного матеріалу (схем, таблиць, слайдів). Під час викладання даної дисципліни викладач проводить опитування здобувачів для того, щоб визначити рівень засвоєння ними викладеного матеріалу, важливим є активність здобувачів. Практичні заняття проходять з використанням комп'ютерної техніки та відповідного програмного забезпечення.

Зазначається система вимог, які викладач ставить перед студентом/аспірантом:

- *правила відвідування занять (як лекцій, так і практичних/лабораторних);*
Відвідування лекцій, практичних занять, а також відсутність на них, не оцінюється. Однак, студентам рекомендується відвідувати заняття, оскільки на них викладається теоретичний матеріал та розвиваються навички, необхідні для формування компетентностей, визначених стандартом освіти. Система оцінювання орієнтована на отримання балів за активність студента, а також виконання завдань, які здатні розвинути практичні уміння та навички. За об'єктивних причин (наприклад, хвороба, працевлаштування, міжнародне стажування тощо) навчання може відбуватися в он-лайн формі за погодженням із керівником курсу.
- *правила поведінки на заняттях (активність, підготовка коротких доповідей чи текстів, відключення телефонів, використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача чи в інтернеті тощо);*
На аудиторних заняттях студент має поважати викладача та дисципліну, що він слухає; Виконувати елементарні правила та норми поведінки; Протягом заняття забороняється користуватися мобільними телефонами, окрім екстрених випадків. Норми етичної

поведінки студентів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

- *правила призначення заохочувальних та штрафних балів;*
не передбачено РСО
- *політика дедлайнів та перескладань;*
Термін здачі кожного виду роботи обговорюється на занятті під час видачі завдання та залежить від типу роботи. Роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин, оцінюються на нижчу оцінку. Перескладання тем (модулів) відбувається за наявності поважних причин.
- *політика щодо академічної доброчесності;*
визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>. Використання додаткових джерел інформації під час оцінювання знань заборонено (у т.ч. мобільних девайсів). Мобільні пристрої дозволяється використовувати лише під час он-лайн тестування та виконання розрахунків.
інші вимоги, що не суперечать законодавству України та нормативним документам Університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

Поточний контроль: виконання практичних робіт (40 балів), написання 1 експрес-контролю (10 балів) та МКР (10 балів). Докладніша інформація щодо поточного контролю та критеріїв оцінювання наведена в РСО з дисципліни. (Додаток 1)

Календарний контроль: для отримання 1 атестації студенту необхідно набрати мінімум 15 балів, для отримання 2 атестації – 40 балів..

Семестровий контроль: Іспит. Загальна сума балів на іспиті – 40 балів. Докладніша інформація щодо проведення та оцінювання наведена в РСО з дисципліни.

Умови допуску до семестрового контролю: семестровий рейтинг не нижче 36 балів, написання МКР та захист усіх практичних робіт.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Додаток 1

Система рейтингових (вагових) балів занять і рейтингових оцінок по видах контролю за рік

№ п/п	Вид контролю	Бал	Кількість	Сума балів
1	Виконання практичних робіт			
	- ваговий бал r_k *	5	8	40
	-якість виконання	0-5		
2	Експрес-контроль			
	-ваговий бал r_k	10	1	10
	- якість виконання**			
3	Модульна контрольна робота			
	-ваговий бал r_k	10	1	10
	- якість виконання***	0-10		
4				60

* - Якість виконання практична робіт:

Допуск	1 бал
Правильно оформлена робота, відповідь на усі запитання	4 балів
Є незначні помилки у відповідях	3 балів

Робота не зарахована

0-2 балів

**** - Якість написання експрес-контролю**

Експрес-контроль складається з 10 питань, кожне питання оцінюється в 1 бал.

Для зарахування експрес-контролю студент має набрати 6 балів та більше ($\geq 60\%$)

Робота вважається не зарахованою, якщо студент набере від 0-5 балів ($< 60\%$)

***** - Якість виконання модульної контрольної роботи. :**

повна розкрита відповідь – 9-10 балів ;
помилка в одному завданні або неповна відповідь в двох завданнях – 7-8 балів ;
помилка в двох завдань або неповна відповідь в 4 завданнях – 5-6 балів;
робота не зарахована – 0 -4 балів.

Розрахунок шкали (R) рейтингу

Сума вагових балів контрольних заходів протягом семестру складає:

$$R = 40 + 10 + 10 = 60 \text{ балів:}$$

Необхідною умовою для одержання допуску до іспиту є здача всіх практичних робіт, написання експрес-контролю та МКР.

Календарний контроль: проводиться в кінці семестру.

Рубіжні (планові атестації). Студент повинен набрати балів:: 1 атестація – «зараховано» - 15 балів (25 – максимум), 2 атестація – 36 балів (50 – максимум).

Семестровий контроль: іспит. Загальна сума балів за дисципліну (100 балів) є сумою балів за семестр (максимально 60 балів) та екзаменаційної роботи (40 балів). Умови допуску до семестрового контролю: семестровий рейтинг не менше 36 балів, написання МКР та виконання практичних робіт.

Екзаменаційний білет складається з 10 питань, 1 питання оцінюється у 4 бали.

Повна відповідь на питання – (4) балів

Зроблені незначні помилки – (3) балів

Суттєві помилки у відповіді – (2) балів

Відповіді не вірні – (0-1) бали.

Робота зарахована у випадку набору за всі питання більше 24 балів

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно

Питання до контрольної роботи з курсу «Біоінформатичні бази даних»

1. Дати визначення поняттю «База даних».
2. Назвати БД SNP.
3. Опишіть принцип побудови часового дерева.
4. Наведіть класифікацію БД ДНК.
5. Дайте загальну характеристику БД IED.
6. Опишіть основні системи пошуку інформації в БД.
7. Дайте загальну характеристику БД UniProt.
8. Наведіть класифікацію БД РНК.
9. Дайте загальну характеристику БД Ligand.
10. Які функції виконують БД ?
11. Назвіть найбільш відомі БД білків.
12. Які події сприяли появі нових наукових напрямків таких як геноміка, протеоміка, метаболоміка, фармакогеноміка?

13. Наведіть класифікацію БД білків.
14. Дайте загальну характеристику БД Brenda.
15. З якими об'єктами оперують БД?
16. Які бази даних об'єднує в собі БД UniProt?
17. Дати визначення генній терапії.
18. Наведіть класифікацію спеціальних БД.
19. Дайте загальну характеристику БД KEGG.
20. Яким чином, зазвичай, класифікують БД?
21. Яка БД містить інформацію про послідовності протеїнів та дані щодо їх функцій, отримані з проектів сиквенсу геномів?
22. Назвіть принципову відмінність генної терапії від традиційних способів лікування.
23. Наведіть класифікацію БД ДНК.
24. Дайте загальну характеристику БД MDT.
25. На які типи за тематикою поділяються БД?
26. Назвіть БД, яка містить просторові структури білків, визначені дослідним шляхом, еволюційну історію і взаємозв'язок між макромолекулами.
27. Назвіть основні доступні проекти в сфері персоналізованої медицини.
28. Наведіть класифікацію БД .
29. Дайте загальну характеристику БД ECoSusc.
30. Наведіть формати представлення інформації в БД .
31. Яка БД містить інформацію щодо номенклатури ферментів, і описує всі типи білків, яким присвоєно номер ЕС (Enzyme Commission)?
32. Які БД спеціалізованих біоінформатичних ресурсів сприяють розвитку послуг персоналізованої медицини?
33. Дайте загальну характеристику БД PDB.
34. Які Ви знаєте основні вимоги до програмного забезпечення баз даних?
35. По яких критеріях реалізовано пошук в БД ENZYME?
36. Дати визначення метаболоміки.
37. Принцип побудови часового дерева.
38. Дайте загальну характеристику БД WormBase.
39. Наведіть приклади архівних БД, та БД, що куруються.
40. В якому розділі UniProt зберігається інформація, взята з наукових публікацій?
41. Назвіть основні типи баз даних, що використовуються в дослідженнях метаболоміки.
42. Дайте загальну характеристику БД Ligand Expo.
43. Дати визначення пан-протеому.
44. Дайте загальну характеристику БД ZebraFish
45. Розкрийте суть роботи програми BLAST.
46. Назвіть найбільш відомі БД сполук.
47. Назвіть БД, яка містить вичерпну інформацію про ферменти. Дати їй загальну характеристику.
48. Дайте загальну характеристику БД PIR.
49. Фармакогеноміка.
50. Фармакоінформатика.
51. Основні етапи в сучасній розробці лікарських засобів.
52. Роль біоінформатики та її методів у розробці лікарських засобів.
53. Поясніть, як ви розумієте поняття «*in silico*»? Чим цей метод відрізняється від *in vitro*?
54. Що таке «Хімічна бібліотека»?
55. Молекулярний докінг. Наведіть як приклад декілька програм, що використовуються для молекулярного докінгу.
56. Що таке вертуальний скринінг?
57. Що таке силове поле?
58. Які є силові поля?
59. Функції потенціалів у силовому полі
60. Розтягнення зв'язків
61. Згин зв'язків

62. Скручування зв'язків
63. Що використовують для відображення молекулярних структур
64. Основні етапи молекулярного докінгу
65. Що таке фармакофори?
66. Як необхідно підготувати структури до молекулярного докінгу
67. Принцип молекулярної динаміки

Питання до екзаменаційної роботи з курсу «Біоінформатичні бази даних»

1. Дати визначення поняттю «База даних».
2. Назвати БД SNP.
3. Опишіть принцип побудови часового дерева.
4. Наведіть класифікацію БД ДНК.
5. Дайте загальну характеристику БД IED.
6. Опишіть основні системи пошуку інформації в БД.
7. Дайте загальну характеристику БД UniProt.
8. Наведіть класифікацію БД РНК.
9. Дайте загальну характеристику БД Ligand.
10. Які функції виконують БД ?
11. Назвіть найбільш відомі БД білків.
12. Які події сприяли появі нових наукових напрямків таких як геноміка, протеоміка, метаболоміка, фармакогеноміка?
13. Наведіть класифікацію БД білків.
14. Дайте загальну характеристику БД Brenda.
15. З якими об'єктами оперують БД?
16. Які бази даних об'єднує в собі БД UniProt?
17. Дати визначення генній терапії.
18. Наведіть класифікацію спеціальних БД.
19. Дайте загальну характеристику БД KEGG.
20. Яким чином, зазвичай, класифікують БД?
21. Яка БД містить інформацію про послідовності протеїнів та дані щодо їх функцій, отримані з проектів сиквенсу геномів?
22. Назвіть принципову відмінність генної терапії від традиційних способів лікування.
23. Наведіть класифікацію БД ДНК.
24. Дайте загальну характеристику БД MDT.
25. На які типи за тематикою поділяються БД?
26. Назвіть БД, яка містить просторові структури білків, визначені дослідним шляхом, еволюційну історію і взаємозв'язок між макромолекулами.
27. Назвіть основні доступні проекти в сфері персоналізованої медицини.
28. Наведіть класифікацію БД .
29. Дайте загальну характеристику БД EcoCyc.
30. Наведіть формати представлення інформації в БД .
31. Яка БД містить інформацію щодо номенклатури ферментів, і описує всі типи білків, яким присвоєно номер ЕС (Enzyme Commission)?
32. Які БД спеціалізованих біоінформатичних ресурсів сприяють розвитку послуг персоналізованої медицини?
33. Дайте загальну характеристику БД PDB.
34. Які Ви знаєте основні вимоги до програмного забезпечення баз даних?
35. По яких критеріях реалізовано пошук в БД ENZYME?
36. Дати визначення метаболоміки.
37. Принцип побудови часового дерева.
38. Дайте загальну характеристику БД WormBase.
39. Наведіть приклади архівних БД, та БД, що куруються.
40. В якому розділі UniProt зберігається інформація, взята з наукових публікацій?
41. Назвіть основні типи баз даних, що використовуються в дослідженнях метаболоміки.

42. Дайте загальну характеристику БД Ligand Expo.
43. Дати визначення пан-протеому.
44. Дайте загальну характеристику БД ZebraFish
45. Розкрийте суть роботи програми BLAST.
46. Назвіть найбільш відомі БД сполук.
47. Назвіть БД, яка містить вичерпну інформацію про ферменти. Дати їй загальну характеристику.
48. Дайте загальну характеристику БД PIR.
49. Фармакогеноміка.
50. Фармакоінформатика.
51. Основні етапи в сучасній розробці лікарських засобів.
52. Роль біоінформатики та її методів у розробці лікарських засобів.
53. Поясніть, як ви розумієте поняття «in silico»? Чим цей метод відрізняється від *in vitro*?
54. Що таке «Хімічна бібліотека»?
55. Молекулярний докінг. Наведіть як приклад декілька програм, що використовуються для молекулярного докінгу.
56. Що таке вертуальний скринінг?
57. Що таке силове поле?
58. Які є силові поля?
59. Функції потенціалів у силовому полі
60. Розтягнення зв'язків
61. Згин зв'язків
62. Скручування зв'язків
63. Що використовують для відображення молекулярних структур
64. Основні етапи молекулярного докінгу
65. Що таке фармакофори?
66. Як необхідно підготувати структури до молекулярного докінгу
67. Принцип молекулярної динаміки

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено: асистент кафедри біоенергетики, біоінформатики та екобіотехнології, к.т.н. Дем'яненко І.В.

Ухвалено: кафедрою біоенергетики, біоінформатики та екобіотехнології ФБТ (протокол № 18 від 25.05.2023 р.)

Погоджено: Методичною комісією факультету біотехнології і біотехніки (протокол № 11 від 26.06.2023 р.)