Вінницький національний технічний університет
Кафедра біомедичної інженерії та оптико-електронних систем
Факультет інформаційних електронних систем

# ОСНОВИ БІОІНФОРМАТИКИ

вибірковий освітній компонент (освітній компонент 1)
І (бакалаврський) рівень вищої освіти
2023–2024 навч. рік

Освітня програма **Біомедична інженерія**
Спеціальність **163 Біомедична інженерія**

Викладач: **Штофель Д. Х.**, к. т. н., доцент
Мови викладання: **українська**
Семестр – **3**
Кредитів ЄКТС – **5**
Лекцій – **36 год.**
Лабораторних – **27 год.**
Самостійна робота – **87 год.**
Вид контролю – **диф. залік**

**Передумови для вивчення**: базові поняття інформатики та знання шкільного курсу біології. Ця дисципліна не потребує спеціальних передумов.

**Мета курсу** полягає у вивченні здобувачами освіти інформаційних технологій та ресурсів, які застосовуються для вирішення біологічних задач, в тому числі з використанням мови програмування Python.

**Компетентності**

1. Здатність вирішувати комплексні проблеми біомедичної інженерії із застосовуванням методів математики, природничих та інженерних наук.
2. Здатність аналізувати складні медико-інженерні та біоінженерні проблеми та здійснювати їх формалізацію для знаходження кількісних рішень із застосуванням сучасних математичних методів та інформаційних технологій.
3. Здатність застосовувати методи програмування для вирішення біологічних задач.

**Результати навчання**

1. Створювати комп'ютерні програми для вирішення біологічних задач на мові Python.
2. Знати і застосовувати алгоритми обробки даних для біоінформатики.
3. Вирішувати задачі обробки та аналізу біологічної інформації.

**Тематика курсу**

***Змістовий модуль 1. Базові поняття та алгоритми біоінформатики.***

**Тема 1. Біоінформатика: для чого і для кого?**

Що включає в себе біоінформатика? Задачі і методи біоінформатики. Біоінформаційні ресурси. Автоматизація та алгоритмізація. Можливості біоінформатики. Програмування на службі біології та медицини.

**Тема 2. Пошук місця старту реплікації ДНК.**

Яку інформацію можна отримати із послідовності нуклеотидів ДНК? Приховані повідомлення і повторювані відрізки. Скільки змін може бути у повідомленні, щоб воно залишилось зрозумілим? Проблема часто повторюваних слів. Як відбувається процес реплікації ДНК? Чи всі приховані повідомлення ДНК знайдені? Пошук місця старту реплікації.

**Тема 3. Ідентифікація мотивів.**

Біологічні годинники та гени, які їх визначають. Поняття мотиву у нуклеотидній послідовності. Ставимо оцінку мотивам. Пошук мотивів та усереднений рядок. Жадібний алгоритм пошуку мотивів. Неочікувані прооблеми при визначенні мотивів. Рандомізований пошук мотиву. Чи справді все так просто? Вибір за алгоритмом Гіббса. Що робити, коли всі мотиви занйдено?

**Тема 4. Як можна зібрати геном?**

Алгоритми відновлення втраченої структури. Задача відновлення тексту. Графи для задач відновлення текстових рядків. Графи, що накладаються, проти графів де Брюйна. Дайте слово Ейлеру (задача Кенігсберзьких мостів)! Збирання геному з пар прочитань. Секвенування геному і роль інформатики у цьому процесі.

**Тема 5. Хто створює антибіотики?**

Що таке антибіотики? Звідки вони беруться? Відкриття і розвиток антибіотикотерапії. Небезпеки і виклики. Передача інформації у клітині. Нуклеотиди-мутанти і амінокислоти-нонконформісти. Відхилення від Центральної догми молекулярної біології. Фрагментація і секвенування антибіотиків (мас-спектрометрія). Алгоритм пошуку грубою силою Алгоритм гілок і меж. У вас якийсь неправильний спектр! Скільки-скільки амінокислот? Спектральна згортка.

***Змістовий модуль 2. Великі дані в біології.***

**Тема 6. Хто мій родич?**

Порівняння біологічних даних у вигляді послідовностей. Вирівнювання ДНК. Вирівнювання білків. Ламаємо код. Як оцінити подібність? Задача туриста у Мангеттені. Що таке динамічне програмування? Розміняйте 18 гривень! Від мангет тенського графа до довільного спрямованого ациклічного графа. Зворотне відстеження у графіку вирівнювання. Бали і штрафи. Зміни налаштувань. Досягаємо висот ефективності. А якщо взяти більше двох послідовностей?

**Тема 7. Ресурси для порівняння біологічних масивів даних.**

Протеоміка. Бази даних Національного центру біотехнологічної інформації (NCBI). Формати FASTA і PDB. Порівняння первинної структури білків. Матриці замін амінокислотних залишків. Рахунок вирівнювання. Засіб для вирівнювання та порівняння білкових послідовностей від Європейського інституту біоінформатики EBI. Парне і множинне вирівнювання. Методи біоінформатики в філогенетичних дослідженнях. Пошук і аналіз гомологічних послідовностей. Технологія пошуку BLAST (засоби пошуку основного локального вирівнювання).

**Тема 8. Звідки ми знаємо, як побудована молекула?**

Пошук структур і файли PDB. Просторові структури молекул білків. Способи відображення біологічних молекул. Засоби візуалізації просторових структур. Технологія візуалізації JSmol. Формат задавання молекул SMILES. Програма візуалізації «Discovery Studio Viewer Pro». Аналіз структурних особливостей білкових молекул. Структурна організація білків. Карти Рамачандрана. Закономірності формування третинної структури білків. Визначення функціональних ділянок. Консервативні та варіабельні ділянки білка. Паттерни гідропатичності. Передбачення просторової структури білка.

**Тема 9. Аналіз нуклеїнових кислот.**

Геноміка. Пошук нуклеотидних послідовностей. Бази даних геномів. Пошук рамки зчитування у ДНК. Відкрита рамка зчитування – інформативна ділянка ДНК. Критерії пошуку генів. Відтворення структури білка на основі нуклеотидної послідовності. Структура транспортної РНК. Передбачення вторинної структури РНК. Лабораторні методи одержання ДНК. Виділення ДНК. Методи секвенування і аналізу нуклеотидних послідовностей.

**Тема 10. Молекулярний дизайн.**

Створення лікарських засобів цілеспрямованої дії. Дослідження структури і фізико-хімічних властивостей нових речовин in silico. Пошук функціонального центра молекули білка. Пошук за допомогою технології BLAST. Пошук шляхом множинного вирівнювання. Аналіз міжмолекулярних взаємодій в комплексі білка з лігандом. Виявлення амінокислотних послідовностей, які відповідають за

взаємодію. Проектування молекулярних структур. Молекулярний дизайн і докінг. Засоби для моделювання взаємодії проектованої молекули та досліджуваного білка.

**Теми практичних занять**

1. Пошук прихованих повідомлень у нуклеотидній послідовності. Побудова мапи частот відрізків.
2. Вирішення задачі збігу відрізків у нуклеотидній послідовності. Вирішення задачі приблизного збігу відрізків.
3. Обчислення рахунку мотивів та їх пошук.
4. Реалізація жадібного алгоритму пошуку мотивів.
5. Реалізація рандомізованого алгоритму пошуку мотивів.
6. Пошук і порівняння біологічних послідовностей за допомогою відкритих ресурсів.
7. Моделювання просторових структур біологічних молекул.
8. Аналіз білкових та нуклеотидних послідовностей.
9. Передбачення взаємодії білкових структур з лігандом.

**Індивідуальні завдання**

Під час вивчення дисципліни здобувачі освіти готують доповіді, презентації, есеї, виконують індивідуальні домашні завдання або дослідні роботи. Крім того, за рішенням кафедри та за узгодженням з науковим керівником здобувачі освіти можуть готувати доповіді на науково-технічні конференції ВНТУ.

**Методи навчання**

Лекція, проблемна лекція, демонстрація, зокрема, з використанням мультимедійних засобів навчання, практичні роботи, підготовка есеїв, доповідей науково-дослідного характеру, зокрема, на щорічну науково-технічні конференції, що проводяться у ВНТУ.

**Форми контролю**

Поточний контроль здійснюється у формі фронтального, індивідуального чи комбінованого контролю знань студентів під час лекційних та практичних занять, захист практичних робіт, тестування, колоквіум (усний або письмовий).

Підсумковий контроль – диф. залік за всіма темами курсу.

**Оцінювання результатів навчання**

| Модуль | Колоквіум | Практичні заняття | Виконання завдань з СР | Разом |
|---|---|---|---|---|
| I | 15 | 25 | 5 | 100 |
| II | 15 | 20 | 10 | |
| За семестр | 30 | 45 | 15 | |

**Шкала підсумкового оцінювання в балах та ЄКТС**

| Сума балів за всі види навчальної діяльності | Оцінка ECTS |
|---|---|
| 90 – 100 | **A** |
| 82 – 89 | **B** |
| 75 – 81 | **C** |
| 64 – 74 | **D** |
| 60 – 63 | **E** |
| 35 – 59 | **FX** незадовільно з можливістю повторного складання |
| 0 – 34 | **F** незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни |

**Політика курсу**

Викладач, здобувачі освіти та всі учасники освітнього процесу з дисципліни зобов'язані дотримуватися морально-етичних норм і правил, які викладені у Кодексі етики ВНТУ, Положенні про академічну доброчесність у ВНТУ, Положенні про рейтингову систему оцінювання навчальних досягнень здобувачів вищої освіти у Вінницькому національному технічному університеті і розуміють, що за порушення викладених у положеннях принципів учасники освітнього процесу несуть повну особисту відповідальність.

**Базові інформаційні ресурси**


1. Інформаційні технології в біології та медицині : навчальний посібник / В. І. Гриценко, А. Б. Котова, М. І. Вовк [та ін.]. К. : Наукова думка, 2007. 383 с.
2. Горобець С. В. Горобець О. Ю., Хоменко Т. А. Основи біоінформатики [Електронний ресурс] : підручник / НТУУ «КПІ». Київ : НТУУ «КПІ», 2010. 156 с. Режим доступу : http://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/774/1/10-11-146.pdf
3. Азнакаєв Е. Г. Моделювання біомедичних процесів. Геноміка : навчальний посібник / МОН України, НАУ. К. : Освіта України, 2011. 428 с.
4. Шмараков І. О., Марченко М. М. Біоінформатика : навчально-методичний посібник. Чернівці : Рута, 2008. 76 с.
5. Concepts in Bioinformatics and Genomics / J. Momand, A. McCurdy, S. Heubach, N. Warter-Perez. New York : Oxford University Press, 2017. 504 p.

6. Compeau P., Pevzner P. Bioinformatics algorithms: an active learning approach. *3rd edition.* La Jolla, California : Active Learning Publishers, 2018. 728 p.

7. Sung W.-K. Algorithms in Bioinformatics: A Practical Introduction / Wing-Kin Sung. Boca Raton : CRC Press, 2009. 407 p.

8. Biotechnology and Biomedical Engineering : Virtual Lab // Amrita Vishwa Vidyapeetham : http://vlab.amrita.edu/index.php?sub=3

9. Кисляк С. В., Настенко Є. А. Основи молекулярної біології та біоінформатики: комп`ютерний практикум. К. : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. 95 с.

10. Волинець Г. П., Бджола В. Г., Ярмолюк С. М. Методи структурної біоінформатики. *Біотехнологія*, 2010. Т. 3, № 4. С. 9–19.