Министерство просвещения Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Ульяновский государственный педагогический университет имени И.Н. Ульянова»
(ФГБОУ ВО «УлГПУ им. И.Н. Ульянова»)

Факультет физико-математического и технологического образования
Кафедра высшей математики

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат: 0233C9D60038B01A9E48C1A3FBB4A9D9F6
Владелец: Титов Сергей Николаевич
Действителен: с 07.07.2023 до 28.04.2038

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебно-методической работе С.Н. Титов

БИОИНФОРМАТИКА

Программа учебной дисциплины профильно-ориентируемого модуля

основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы магистратуры по направлению подготовки
06.04.01 Биология,
направленность (профиль) образовательной программы
Биотехнология с основами нанотехнологий
(очная форма обучения)

Составители:
Цыганов А.В., профессор кафедры высшей математики
Кувшинова А.Н., доцент кафедры высшей математики
Голубков А.В., доцент кафедры высшей математики

Рассмотрено и одобрено на заседании ученого совета естественно-географического факультета, от «31» мая 2023 г. № 6

Ульяновск, 2023

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Биоинформатика» относится к дисциплинам обязательной части Блока 1. Дисциплины (модули) Профильно-ориентируемого модуля учебного плана основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы магистратуры по направлению подготовки 06.04.01 Биология, направленность (профиль) образовательной программы «Биотехнология с основами нанотехнологий», очной формы обучения.

Дисциплина опирается на результаты обучения, сформированные в рамках дисциплин и практик бакалавриата.

Результаты освоения дисциплины являются основой изучения дисциплин для профессиональной деятельности и прохождения государственной итоговой аттестации.

1. Перечень планируемых результатов обучения (образовательных результатов) по дисциплине

Целью освоения дисциплины является формирование у обучающихся знаний, умений и навыков в области использования современных информационных технологий обработки данных молекулярной биологии.

Задачей освоения дисциплины является знакомство с содержанием базовых понятий, предмета, методов и принципов биоинформатики, формирование представления о современном биоинформационном программном обеспечении, обучение владению современными методами биоинформатики.

В результате освоения программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения:

Компетенция и индикаторы ее достижения в дисциплине	Образовательные результаты дисциплины (этапы формирования дисциплины)		
	Знает	Умеет	Владеет
ОПК-4. Способен участвовать в проведении экологической экспертизы территорий и акваторий, а также технологических производств с использованием биологических методов оценки экологической и биологической безопасности.			
ИОПК 4.1. Знает теоретические основы, методы и нормативную документацию в области	ОР-1 Знает способы проведения биологической экспертизы и занесения информации в базы		

экологической экспертизы, особенности обследования и оценки экологического состояния территорий и акваторий, методы тестирования эффективности и биобезопасности продуктов технологических производств.	данных		
ИОПК 4.2. Умеет применять профессиональные знания и навыки для разработки и предложения инновационных средств и методов экологической экспертизы.		ОР-2 умеет применять навыки разработки инновационных средств и методов экологической экспертизы.	
ИОПК 4.3. Владеет опытом планирования экологической экспертизы на основе анализа имеющихся фактических данных.			ОР-3 планирует экологическую экспертизу на основе данных

2. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Номер семестра	Учебные занятия						Форма промежуточной аттестации
	Всего		Лекции, час	Практические занятия, час	Лабораторные занятия, час	Самостоят. работа, час	
	Трудоемк.						
	Зач. ед.	Часы					
1	3	108	4	20	-	57	экзамен
Итого:	3	108	4	20	-	57	экзамен

3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

3.1. Указание тем (разделов) и отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Наименование раздела и тем	Количество часов по формам организации обучения			
	Лекционные занятия	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятель-ная работа
Введение в дисциплину		4		7
Сравнение последовательностей	2	8		20
Биоинформационные базы данных	2	4		20
Молекулярная эволюция		4		10
Всего по дисциплине:	**4**	**20**		**57**

3.2. Краткое описание содержания тем (разделов) дисциплины

Краткое содержание курса

Тема 1. Введение в дисциплину

Биоинформатика – предмет и методы исследований. История развития биоинформационных методов. Основные задачи и методы биоинформатики в исследовании генома и протеома.

Интерактивная форма: «Учебная дискуссия».

Тема 2. Сравнение последовательностей

Математические основы выравнивания последовательностей символов. Scoring functions, матрицы аминокислотных замен. Алгоритмы глобального выравнивания Нидлмана-Вунша, локального выравнивания Смита-Ватермана и оценка их вычислительной сложности. Семейство алгоритмов BLAST. Множественное выравнивание, семейство программ Clustal.

Интерактивная форма: «Учебная дискуссия».

Тема 3. Биоинформационные базы данных

Структура биоинформационных баз данных, классификация баз по способу заполнения, основные базы данных, базы, содержащие результаты глобальных экспериментов, банки белковых семейств, метаболические базы данных генетические банки, специализированные банки данных. Инструменты поиска научных публикаций.

Интерактивная форма: «Учебная дискуссия».

Тема 4. Молекулярная эволюция

Эволюция молекул и организмов, ортологи и паралоги, горизонтальный перенос, деревья видов и деревья генов. Филогенетическое дерево как математический объект. Модели эволюции, алгоритмы построения филогенетических деревьев, матрица расстояний методы, основанные на матрице расстояний, другие методы. Алгоритмические проблемы поиска оптимального дерева, согласование деревьев. Эволюция на уровне генома.

Интерактивная форма: «Учебная дискуссия».

4. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Самостоятельная работа студентов является особой формой организации учебного процесса, представляющая собой планируемую, познавательно, организационно и методически направляемую деятельность студентов, ориентированную на достижение конкретного результата, осуществляемую без прямой помощи преподавателя. Самостоятельная работа студентов является составной частью учебной работы и имеет целью закрепление и углубление полученных знаний и навыков, поиск и приобретение новых знаний, а также выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям и экзамену. Она предусматривает, как правило, разработку рефератов, написание докладов, выполнение творческих, индивидуальных заданий в соответствии с учебной программой (тематическим планом изучения дисциплины). Тема для такого выступления может быть предложена преподавателем или избрана самим студентом, но материал выступления не должен дублировать лекционный материал. Реферативный материал служит дополнительной информацией для работы на практических занятиях. Основная цель данного вида работы состоит в обучении студентов методам самостоятельной работы с учебным материалом. Для полноты усвоения тем, вынесенных в практические занятия, требуется работа с первоисточниками. Курс предусматривает самостоятельную работу студентов со специальной литературой. Следует отметить, что самостоятельная работа студентов результативна лишь тогда, когда она выполняется систематически, планомерно и целенаправленно.

Задания для самостоятельной работы предусматривают использование необходимых терминов и понятий по проблематике курса. Они нацеливают на практическую работу по применению изучаемого материала, поиск библиографического материала и электронных источников информации, иллюстративных материалов. Задания по самостоятельной работе даются по темам, которые требуют дополнительной проработки.

Общий объем самостоятельной работы студентов по дисциплине включает аудиторную и внеаудиторную самостоятельную работу студентов в течение семестра.

Аудиторная самостоятельная работа осуществляется в форме выполнения тестовых заданий, кейс-задач, письменных проверочных работ по дисциплине. Аудиторная самостоятельная работа обеспечена базой тестовых материалов, кейс-задач по разделам дисциплины.

Внеаудиторная самостоятельная работа осуществляется в формах:

– подготовки к устным докладам (подготовка рефератов);
– решение задач (домашних заданий) по изучаемым темам;
– выполнение групповых интерактивных заданий.

ОС-1. Самостоятельная работа

В рабочей директории три файла:

- file1.txt - произвольный участок аминокислотной последовательности вашего белка длиной 30 аминокислот;

- file2.txt - тот же самый участок аминокислотной последовательности, в который внесите три произвольные аминокислотные замены;

- file3.txt - произвольный участок аминокислотной последовательности вашего белка длиной 10 аминокислот.

С помощью программы BLASTP проведите поиск по банку данных Swiss-Prot для последовательности из файла file1.txt. Найдите в результирующем списке ваш белок. Определите порядковый номер, E-value, Score и занесите значения в файл отчета.

Повторите аналогичную процедуру для последовательности из файлов file2.txt и file3.txt. В кратком комментарии объясните полученные результаты.

ОС-2. Самостоятельная работа

С помощью программы BLASTP проведите поиск гомологов белка XylA из Escherichia coli по банку данных Swiss-Prot. В файле результатов заполните таблицу для

a) наилучшего хита;

b) гомолога с наибольшим значением E-value (самый “далекий” гомолог);

c) негомолога с наименьшим значением E-value (самый “близкий” негомолог);

d) наихудшего хита;

e) гомолога из Bacillus subtilis.

Проведите аналогичный поиск по банку данных “non-redundant”. Определите параметры для гомолога из Bacillus subtilis и занесите их в таблицу в строке соответствующей пункту f).

Сравните между собой пункты e) и f). Поясните причину отличий.

Опишите, как вы отличали гомологов от негомологов: определите пороговое значение E-value для гомологов, опишите, как ведет себя E-value на границе раздела гомологов и негомологов.

ОС-3. Тест

1. Мутация, при которой единичная замена основания оставляет аминокислотную последовательность неизменной, называется

а) нонсенс-мутация

б) обратная замена

в) «молчащая» мутация

г) миссенс-мутация

2. Универсальность генетического кода – это

а) кодирование одним триплетом одной либо нескольких аминокислот

б) кодирование одной аминокислоты несколькими триплетами

в) кодирование одной аминокислоты одним триплетом

г) наличие единого кода для всех существ на Земле

3. Выравнивание – это:

а) сравнение последовательностей нуклеотидов с «липкими концами»

б) сравнение аминокислотных последовательностей белков по длине

в) сравнение нуклеотидных последовательностей по длине

г) сравнение последовательностей в поиске идентичных серий символов

4. Для нахождения консервативных регионов в наборе последовательностей применяется преимущественно

а) множественное выравнивание

б) локальное выравнивание

в) глобальное выравнивание

г) структурное выравнивание

5. Какое из перечисленных ниже выравниваний применяется к «похожим» последовательностям приблизительно одинаковой длины и наглядно показывает разницу между этими последовательностями

а) локальное

б) множественное

в) глобальное

г) структурное

6. Выравнивание нуклеотидных или аминокислотных последовательностей с самым высоким весом называют

а) оптимальным

б) множественным

в) глобальным

г) структурным

7. Расстояние по Левенштайну или «редакционное расстояние» между двумя строками

а) минимальное число «операций редактирования» для того, чтобы превратить одну строку в другую

б) максимальное число «операций редактирования» для того, чтобы превратить одну строку в другую

в) минимальное число замен позиций в строке для того, чтобы превратить одну строку в другую

г) минимальное число вставок для того, чтобы превратить одну строку в другую

8. PSI-BLAST – это программа, которая

а) позволяет проводить анализ популяционно-генетических данных

б) осуществляет филогенетический анализ с использованием метода парсимонии

в) подбирает данные для последовательностей, аналогичных запрошенной

г) проводит множественное выравнивание нуклеотидных и аминокислотных последовательностей

9. Какая из перечисленных ниже программ используется для множественного выравнивания последовательностей ДНК и белков

а) ClustalW

б) BLAST

в) DALI

г) CASP

10. Филогенетическое дерево (эволюционное дерево, дерево жизни) – дерево, отражающее эволюционные взаимосвязи между различными видами или другими сущностями, имеющими общего предка. Вершины филогенетического дерева делятся на три класса (отметить неверное):

а) листья

б) стволы

в) узлы

г) корень

Для самостоятельной подготовки к занятиям по дисциплине рекомендуется использовать учебно-методические материалы:

1. Цыганов А.В. Вычислительная геномика. Методические указания лекционных и практических занятий для магистров 1 курса 1 семестра направления подготовки 06.04.01 «Биология». Профиль: Биотехнология с основами нанотехнологий (очная форма обучения). Ульяновск: Изд-во УлГПУ.- с. 13.

5. Примерные оценочные материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Организация и проведение аттестации студента

ФГОС ВО ориентированы преимущественно не на сообщение обучающемуся комплекса теоретических знаний, но на выработку компетенций – динамического набора знаний, умений, навыков и личностных качеств, которые позволят выпускнику стать конкурентоспособным на рынке труда и успешно профессионально реализовываться.

В процессе оценки необходимо используются как традиционные, так и инновационные типы, виды и формы контроля. При этом постепенно традиционные средства совершенствуются в русле компетентностного подхода, а инновационные средства адаптированы для повсеместного применения в российской вузовской практике.

Цель проведения аттестации – проверка освоения образовательной программы дисциплины-практикума через сформированность образовательных результатов.

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины; помогает оценить крупные совокупности знаний и умений, формирование определенных компетенций.

Оценочными средствами текущего оценивания являются: доклад, тесты по теоретическим вопросам дисциплины, защита практических работ и т.п. Контроль усвоения материала ведется регулярно в течение всего семестра на практических (семинарских, лабораторных) занятиях.

№ п/п	**СРЕДСТВА ОЦЕНИВАНИЯ,** используемые для текущего оценивания показателя формирования компетенции	Образовательные результаты дисциплины
	Оценочные средства для текущей аттестации ОС-1, ОС-2, ОС-3	ОР-1 Знает способы проведения биологической экспертизы и занесения информации в базы данных ОР-2 умеет применять навыки разработки инновационных средств и методов экологической экспертизы. ОР-3 планирует экологическую экспертизу на основе данных
	Оценочные средства для промежуточной аттестации (экзамен) экзамен в форме устного собеседования	

Описание оценочных средств и необходимого оборудования (демонстрационного материала), а так же процедуры и критерии оценивания индикаторов достижения компетенций на различных этапах их формирования в процессе освоения образовательной программы представлены в Фонде оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине.

Материалы, используемые для текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

Материалы для организации текущей аттестации представлены в п.5 программы.

Материалы, используемые для промежуточного контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. История развития биоинформационных методов.
2. Основные задачи и методы биоинформатики.
3. Математические основы выравнивания последовательностей.
4. Локальное выравнивание последовательностей.
5. Глобальное выравнивание последовательностей.
6. Множественное выравнивание.
7. Семейство алгоритмов BLAST.
8. Классификация и примеры биоинформационных баз данных. Структура биоинформационных баз данных.
9. Поиск гомологов в базах данных, интерпретация результатов, сравнение алгоритмов.
10. Эволюция молекул и организмов. Ортологи и паралоги.
11. Горизонтальный перенос.
12. Деревья видов и деревья генов. Филогенетическое дерево как математический объект.
13. Модели эволюции.

14. Алгоритмы построения филогенетических деревьев.
15. Алгоритмические проблемы поиска оптимального дерева, согласование деревьев.
16. Эволюция на уровне генома.

В конце изучения дисциплины подводятся итоги работы студентов на лекционных и практических занятиях путем суммирования заработанных баллов в течение семестра.

Критерии оценивания знаний обучающихся по дисциплине

Формирование балльно-рейтинговой оценки работы обучающихся

		Посещение лекций	Посещение практических занятий	Работа на практических занятиях	Экзамен
1 семестр	Разбалловка по видам работ	2 х 1=2 баллов	10 х 1=10 баллов	224 балла	64 балла
	Суммарный макс. балл	2 балла max	12 баллов max	236 баллов max	300 баллов max

Критерии оценивания работы обучающегося по итогам семестра

	Баллы (3 ЗЕ)
«отлично»	более 271
«хорошо»	211-270
«удовлетворительно»	151-210
«не удовлетворительно»	150 и менее

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Успешное изучение курса требует от обучающихся посещения лекций, активной работы на практических занятиях, выполнения всех учебных заданий преподавателя, ознакомления с основной и дополнительной литературой.

Запись **лекции** – одна из форм активной самостоятельной работы обучающихся, требующая навыков и умения кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения, выводы, обобщения, формулировки. В конце лекции преподаватель оставляет время (5 минут) для того, чтобы обучающиеся имели возможность задать уточняющие вопросы по изучаемому материалу. Из-за недостаточного количества аудиторных часов некоторые темы не удается осветить в полном объеме, поэтому преподаватель, по своему усмотрению, некоторые вопросы выносит на самостоятельную работу студентов, рекомендуя ту или иную литературу. Кроме этого, для лучшего освоения материала и систематизации знаний по дисциплине, необходимо постоянно разбирать материалы лекций по конспектам и учебным пособиям. В случае необходимости обращаться к преподавателю за консультацией.

Подготовка к практическим занятиям.

При подготовке к практическим занятиям студент должен изучить теоретический материал по теме занятия (использовать конспект лекций, изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, при необходимости дополнить конспект, делая в нем соответствующие записи из литературных источников). В случае затруднений, возникающих при освоении теоретического материала, студенту следует обращаться за консультацией к преподавателю. Идя на консультацию, необходимо хорошо продумать вопросы, которые требуют разъяснения.

В начале практического занятия преподаватель знакомит студентов с темой, оглашает план проведения занятия, выдает задания. В течение отведенного времени на выполнение

работы студент может обратиться к преподавателю за консультацией или разъяснениями. В конце занятия проводится прием выполненных заданий, собеседование со студентом.

Результаты выполнения практических зданий оцениваются в баллах, в соответствии с балльно-рейтинговой системой университета.

Планы лабораторных занятий

Занятие 1. Введение в дисциплину

План:

1. Биоинформатика – предмет и методы исследований.
2. История развития биоинформационных методов.
3. Основные задачи и методы биоинформатики в исследовании генома и протеома.

Занятие 2. Математические основы выравнивания последовательностей

План:

1. Виды выравнивания.
2. Scoring functions.
3. Матрицы аминокислотных замен.
4. Решение задач.

Занятие 3. Глобальное и локальное выравнивание последовательностей

План:

1. Алгоритм Нидлмана-Вунша.
2. Алгоритм Смита-Ватермана.
2. Решение задач.

Занятие 4. Алгоритмы и программы семейства BLAST

План:

1. Семейство алгоритмов BLAST.
2. Самостоятельная работа (ОС-1, ОС-2)

Занятие 5. Множественное выравнивание

План:

1. Семейство программ Clust.
2. Решение задач.

Занятие 6. Биоинформационные базы данных

План:

1. Виды и структура биоинформационных баз данных, классификация баз по способу заполнения.
2. Основные и специализированные базы данных.
3. Инструменты поиска научных публикаций.

Занятие 7. Работа с биоинформационными базами данных

План:

1. Работа с системой GenBank.
2. Работа с системой PubMed.

Занятие 8. Молекулярная эволюция

План:

1. Эволюция молекул и организмов, ортологи и паралоги, горизонтальный перенос, деревья видов и деревья генов.

2. Филогенетическое дерево как математический объект. Модели эволюции, алгоритмы построения филогенетических деревьев, матрица расстояний методы, основанные на матрице расстояний, другие методы.

Занятие 9. Молекулярная эволюция. Зачет

План:

1. Алгоритмические проблемы поиска оптимального дерева, согласование деревьев. Эволюция на уровне генома.
2. Тест (ОС-3).
3. Зачет.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, Интернет-ресурсов, необходимых для освоения дисциплины

Основная литература

1. Дьяконов, В. П. MATLAB 6.5 SP1/7/7 SP1/7 SP2 + Simulink 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики : практическое пособие : [16+] / В. П. Дьяконов, В. В. Круглов. – Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2009. – 454 с. – ISBN 5-98003-255-X – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=117721

2. Системная компьютерная биология / ред. Н.А. Колчанов, В.А. Лихошвай, С.С. Гончаров, В.А. Иванисенко. – Новосибирск : Сибирское отделение Российской академии наук, 2008. – 768 с. – (Интеграционные проекты СО РАН; вып. 14). – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=97735

Дополнительная литература

1. Мандель, Б.Р. Основы современной генетики: учебное пособие для учащихся высших учебных заведений (бакалавриат) / Б.Р. Мандель. – Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2016. – 334 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=440752

2. Пак, И.В. Введение в биотехнологию : учебное пособие : [16+] / И.В. Пак, О.В. Трофимов, О.А. Величко ; Тюменский государственный университет. – 3-е изд., перераб. и доп. – Тюмень : Тюменский государственный университет, 2018. – 160 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=567615

Интернет-ресурсы

–https://www.ncbi.nlm.nih.gov – National Center for Biotechnology Information;

–https://www.intuit.ru – Национальный открытый университет.

Лист согласования рабочей программы
учебной дисциплины

Направление подготовки: 06.04.01 Биология
Профиль: Биотехнология с основами нанотехнологий
Рабочая программа Бионифоматика
Составитель: – А.В. Цыганов, А.В. Голубков Ульяновск: УлГПУ, 2023.

Программа составлена с учетом федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 06.04.01 Биология, профиль подготовки «Биотехнология с основами нанотехнологий», утверждённого Министерством образования и науки Российской Федерации, и в соответствии с учебным планом.

Составитель _____ А.В. Цыганов (подпись)
Составитель _____ А.В. Голубков (подпись)

Рабочая программа учебной дисциплины (практики) одобрена на заседании кафедры высшей математики "23" мая 2023г., протокол № 10
Заведующий кафедрой
_____ И.В. Столярова 23.05.23
личная подпись *расшифровка подписи* *дата*

Рабочая программа учебной дисциплины (практики) согласована с библиотекой
Сотрудник библиотеки
_____ Ю.Б. Марсакова 2.05.23
личная подпись *расшифровка подписи* *дата*

Программа рассмотрена и одобрена на заседании ученого совета естественно-географического факультета "31" мая 2023 г., протокол № 6
Председатель ученого совета естественно-географического факультета
_____ Д.А. Фролов 31.05.23
личная подпись *расшифровка подписи* *дата*