

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
«Ульяновский государственный университет»
ПИШ «ФармИнжиниринг»

Лямина Д.А.

Биоинформатика

Методические указания для самостоятельной работы студентов и по
выполнению практических занятий
для студентов специальности 06.04.01 «Биология», Биофарминжиниринг

Ульяновск
2024

Утверждено координационным советом Передовой инженерной школы
«ФармИнжиниринг» Ульяновского государственного университета, протокол
№ 2 от 2024г.

Рекомендовано к введению в образовательный процесс.

Лямина Д.А.

Биоинформатика: методические указания для самостоятельной работы студентов и по выполнению практических занятий для студентов специальности 06.04.01 «Биология», Биофарминжиниринг / Д.А. Лямина. – Ульяновск : УлГУ, 2024. – 25 с.

В пособии даны темы и вопросы к ПЗ, ЛР и СРС по предмету «Биоинформатика». Предназначено для студентов высших учебных заведений, специальности 06.04.01 «Биология», Биофарминжиниринг.

© Д.А. Лямина, 2024

© Ульяновский государственный университет, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Самостоятельная работа студентов	5
Контролируемые темы дисциплины	8
Вопросы к экзамену	21
Список используемой литературы	24
Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы...25	

ВВЕДЕНИЕ

Целью данного пособия курса «*Биоинформатика*» дать основные тематика для выполнения практических и самостоятельных работ. В дисциплине изучаются основные принципы анализа биоинформатических данных.

Цель дисциплины – формирование у студентов навыков, соответствующих видам профессиональной деятельности, необходимых для решения профессиональных задач.

Задача дисциплины – приобретение студентами необходимых знаний о сборке генома и транскриптома, аннотирование данных, работа с базами данных.

10.САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ

Форма обучения: очная

Название разделов и тем	Вид самостоятельной работы	Объем в часах	Форма контроля
Тема 1.Введение в биоинформатику. Основные технологии секвенирования. Принцип метода выделения нуклеиновых кислот. Подготовка библиотек для секвенирования. Генетический баркодинг.	Проработка учебного материала, решение теста, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка домашнего задания, тест, экзамен.
Тема 2. Методы анализа данных и текстовой информации. Алгоритмы. Форматы. Работа с базами данных.	Проработка учебного материала, решение теста, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка домашнего задания, тест, проверка лабораторной работы, экзамен.
Тема3.Контроль качества результатов секвенирования и исправления ошибок.	Проработка учебного материала, сдача протокола, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка протокола, проверка лабораторной работы, экзамен.
4.Картирование прочтений на референсный геном. Анализ данных полногеномного и полноэкзомного секвенирования.	Проработка учебного материала, решение задач, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка заданий, проверка лабораторной работы, экзамен.

5.Онлайн сервис Galaxy для обработки.	Проработка учебного материала, решение задач, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка заданий, экзамен.
6.Филогенетика.	Проработка учебного материала, решение задач, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка заданий, проверка лабораторной работы, экзамен.
7.Сборка геномов и транскриптомов.	Проработка учебного материала, решение задач, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка заданий, экзамен.
8.Метагеномика.	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена.	2	Проверка домашнего задания, проверка лабораторной работы, экзамен.
9.РНК секвенирование. Анализ данных секвенирования единичных клеток.	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче лабораторной работы, подготовка к сдаче экзамена	2	Проверка домашнего задания, проверка лабораторной работы, экзамен
10. Биоинформатика белков.	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче экзамена	4	Тест, экзамен

11.Работа с базами данных белковых структур (RSCB PDB).	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче экзамена	8	Тест, проверка лабораторной работы, экзамен
12.Работа с базами данных пептидных структур.	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче экзамена	8	Тест, проверка лабораторной работы, экзамен
13.Применение ПО для 2D и 3D конструирования пептидных последовательностей.	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче экзамена	8	Тест, проверка лабораторной работы, экзамен
14.Применение ПО для моделирования взаимодействия "лиганд-мишень" (молекулярный докинг).	Проработка учебного материала, подготовка к сдаче экзамена	8	Тест, проверка лабораторной работы, экзамен

КОНТРОЛИРУЕМЫЕ ТЕМЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Тема 1. Введение в биоинформатику. Основные технологии секвенирования. Принцип метода выделения нуклеиновых кислот. Подготовка библиотек для секвенирования. Генетический баркодинг.

Вопросы к СРС:

1. История развития биоинформатики.
2. Секвенирование первого, второго и третьего поколения.
3. Выделение нуклеиновых кислот.
4. Этапы и методы подготовки библиотек.

Список рекомендуемой литературы:

Список рекомендуемой литературы

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 2. Методы анализа данных и текстовой информации. Алгоритмы. Форматы. Работа с базами данных.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Асимптотический анализ времени работы алгоритмов.
2. Сортировки пузырьком, выбором, вставками и слиянием.
3. Двоичный поиск.

4. Динамическое программирование.
5. Алгоритм предсказания вторичной структуры РНК.
6. Глобальное и локальное выравнивание, теория графов (DFS, BFS), графы де Брейна.
7. Форматы fasta, fastq, vcf, bam/sam, bed, gtf/gff.
8. Базы данных.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 3. Картирование прочтений на референсный геном. Анализ данных полногеномного и полноэкзомного секвенирования.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Процесс анализа сиквенсных данных с ответвлениями или этапами для частных случаев.
2. Понятие качества чтения.
3. Источники ошибок и особенности чтений, полученных на разных платформах.
4. Подготовка чтений (тримминг).
5. Технические последовательности.
6. Разбор отчетов FastQC.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 4. Картирование прочтений на референсный геном. Анализ данных полногеномного и полноэкзомного секвенирования.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Ресеквенирование.
2. Парные выравнивания.
3. Алгоритмы картирования чтений на геном.
4. Программы-картировщики и основные форматы данных, используемые для хранения выравниваний.
5. Терминология картирования.
6. Особенности парных чтений.
7. Влияние референса.
8. Поиск структурных вариантов (SNV-calling).
9. Обзор принципа метода.
10. Описание типичного протокола поиска однонуклеотидных полиморфизмов.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL :

<https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>

2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 5. Онлайн сервис Galaxy для обработки.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Схема для обработки биоинформатических данных.
2. Составление пайплайнов.
3. Работа в NCBI.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.

4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 6. Филогенетика.

Вопросы к СРС:

1. Основы филогенетического анализа.
2. Множественные выравнивания.
3. Построение филогенетического дерева.
4. Аннотация генома.
5. Поиск белок-кодирующих генов.
6. Функциональная аннотация по гомологии, выявление консервативных доменов.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 7. Сборка геномов и транскриптомов.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Чтение, длина вставки, контиг, скаффолд, покрытие, k-mer, N50.
2. Выбор платформы и библиотек.
3. Чем хорошая сборка отличается от плохой.

4. Разбор типовых ошибок.
5. Практикум на гибридной сборке с данных Illumina и Oxford Nanopore.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т., Коровкин Б. Ф. - 3-е изд., стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 8. Метагеномика.

Вопросы к СРС:

1. Методы профилирования состава микробиома на основании NGS.
2. Ампликонное и shotgun (WGS) секвенирование.
3. Референсные базы данных (SILVA, GreenGenes, RDP).
4. Предобработка ридов и таксономическая классификация 16S рРНК/ITS данных (QIIME2, DADA2, Deblur).
5. Определение состава сообщества по shotgun-метагеномам: от кладоспецифичных маркеров (MetaPhlan2) до анализа MAG (MetaBat2).
6. Hi-C метагеномика. Предсказание метаболического потенциала по 16S рРНК данным (PICRUSt, Tax4fun, FAPROTAX).
7. Работа с программой MEGA, UGENE.
8. Особенности статистической обработки данных по составу микробиоты: разреженность (виды нулей в таблице представленностей, замена на псевдо-отсчеты, GBM и пакет zCompositions в R), композиционность (alr-, clr- и ilr- преобразования, методы philr, selbal, gneiss, DBA, amalgam).

Альфа- и бета-разнообразие: метрики (chao1, Shannon, UniFrac, Bray-Curtis, Aitchison distance), визуализация (MDS, PCoA).

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 9. РНК секвенирование. Анализ данных секвенирования единичных клеток.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Введение. Контроль качества.
2. Fastqc, multiqc.
3. Тримминг и фильтрация ридов.
4. Картирование STAR.
5. Сборка транскриптов.
6. Stringtie.
7. Квантификация (htseq-count, stringtie, etc).
8. Проверка самосогласованности: корреляционная тепловая карта, PCA/MDS, поправка на множественные сравнения.
9. Batch effect, поиск выбросов.
10. Линейные модели, дизайн экспериментов, нормализация.
11. Дифференциальная экспрессия (edgeR, DESeq2),

дифференциальный сплайсинг, функциональный анализ (WebGestalt, clusterProfiler).

12. Визуализация данных RNA-seq в IGV и при помощи R. Анализ коэкспрессии генов (WGCNA).

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т., Коровкин Б. Ф. - 3-е изд., стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 10. Биоинформатика белков.

Вопросы к ПЗ и СРС:

1. Парадигма действия лекарства. Белки-мишени.
2. Лиганды. Стадии разработки лекарств (молекулярное моделирование, докинг, скоринг, скрининг).
3. Расчет свободной энергии связывания.
4. Метод молекулярной динамики.
5. Измерение ингибирующей концентрации IC₅₀.
6. Межмолекулярное взаимодействие. Силовые поля. Структуры молекул белков. докинг.
7. Энергия связывания белок-лиганд.
8. Конформации белков.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 11. Биоинформатика белков.

Вопросы к ПЗ, ЛР и СРС:

1. Комплекс белок-лиганд.
2. База данных Protein Data Bank, Protein Data Bank Japan, Biological Magnetic Resonance Data Bank
3. Макромолекулы, малые молекулы.
4. PDB-файл.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с.

Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.

4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 12. Биоинформатика белков.

Вопросы к ЛР и СРС:

1. Базы данных пептидных структур -JenaLib, OPM, Proteopedia, SCOP, Uniprot. FASTA, SMILES, mol2 форматы.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 13. Применение ПО для 2D и 3D конструирования пептидных последовательностей.

Вопросы к ЛР и СРС:

1. Программы для построения 3D моделей белков: PepFold,

Phyre, CONCORD, MOLGEO, Molergo Molecular Viewer.
PyMOL - системы визуализации молекул.

2. Avogadro, OpenBabel - молекулярный редактор.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Тема 14. Применение ПО для моделирования взаимодействия "лиганд-мишень" (молекулярный докинг)

Вопросы к ЛР и СРС:

1. Программы для молекулярного докинга (AutoDock, FroDock, HawkDock, HREDOCK).
2. Подготовка белка для докинга.
3. Работа в программе HawkDock. Работа в программе FroDock.
4. Работа в программе HREDOCK
5. Подготовка лиганда.
6. Протонирование нативного лиганда (визуальный редактор Avogadro и программа OpenBabel).
7. Подготовка протеина.
8. Анализ результатов докинга.

Список рекомендуемой литературы:

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

Таблица 1 - Шкала оценки ответов на практическом занятии

Оценка	Критерии оценки
«Отлично»	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ответ четко выстроен, отражает проблематику, имеет четкие выводы, полностью характеризующие работу. Автор отлично ориентируется в материале и отвечает на все вопросы, владеет специальной терминологией. 2. Студент активно участвует в обсуждении ответов других студентов из группы
«Хорошо»	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ответ структурирован, допущены неточности, выводы нечеткие. Автор затрудняется ответить на вопросы, слабо использует специальную терминологию. 2. Студент участвует в обсуждении ответов других студентов из группы

«Удовлетворительно»	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ответ структурирован, содержание не полностью раскрывает вопрос. 2. Студент пассивен при обсуждении ответов других студентов из группы
«Неудовлетворительно»	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ответ не структурирован/отсутствует. Автор не владеет материалом. 2. Студент не участвует в обсуждении ответов.

Вопросы к экзамену

№ задания	Формулировка вопроса
1.	Выделение нуклеиновых кислот. Подготовка библиотек для секвенирования.
2.	История развития биоинформатики. Секвенирование.
3.	Секвенирование первого поколения. Преимущества и недостатки.
4.	Секвенирование второго и третьего поколения. Преимущества и недостатки.
5.	Базы данных.
6.	Способы контроля качества сборки. Основные параметры. Программы.
7.	Исправление ошибок, тримминг. Программы.
8.	Картирование.
9.	Анализ дифференциальной экспрессии.
10.	Сборка транскриптома, способы контроля качества.
11.	Базовые этапы молекулярно-филогенетического анализа.
12.	Парное выравнивание.
13.	Аффинные штрафы.
14.	Методы контроля качества и улучшения геномных сборок.
15.	Описание геномных интервалов.
16.	Метагеномика.
17.	Альфа и бета разнообразие.
18.	РНК секвенирование.
19.	Анализ секвенирования единичных клеток.
20.	Формат fastq/fastq.
21.	Формат vcf.
22.	Формат bam/sam.
23.	Формат bed.
24.	Формат gtf/gff.
25.	Парадигма действия лекарства.
26.	Белки-мишени и лиганды.
27.	Стадии разработки лекарств (моделирование, докинг, скоринг, скрининг).
28.	Расчет свободной энергии связывания.
29.	Метод молекулярной динамики.
30.	Измерение ингибирующей концентрации IC ₅₀ .
31.	Межмолекулярное взаимодействие.
32.	Силовые поля.
33.	Структуры молекул белков. докинг.

34.	Энергия связывания белок-лиганд.
35.	Конформации белков.
36.	Комплекс белок-лиганд.
37.	База данных Protein Data Bank. Макромолекулы, малые молекулы.
38.	Рабочие форматы белковых молекул (PDB, FASTA, SMILES, mol2).
39.	Базы данных пептидных структур. Работа в Uniprot
40.	Программы для построения 3D моделей белков.
41.	Программы для молекулярного докинга.
42.	Подготовка белка для докинга.
43.	Работа в программе HPERDOCK, форматы загрузок, анализ результатов.
44.	Работа в программе FroDock, форматы загрузок, анализ результатов.
45.	Подготовка лиганда.
46.	Протонирование нативного лиганда, визуальный редактор Avogadro.
47.	Подготовка протеина. Определение активного центра белка.
48.	Молекулярный докинг.
49.	Анализ результатов докинга.

Критерии и шкалы оценки:

- критерии оценивания – правильные ответы на поставленные вопросы;
- показатель оценивания – процент верных ответов на вопросы;
- шкала оценивания(оценка) – выделено 4 уровня оценивания компетенций:
высокий (отлично) - более 80% правильных ответов;
достаточный(хорошо) – от 60 до 80 % правильных ответов;
пороговый(удовлетворительно) – от 50 до 60% правильных ответов;
критический(неудовлетворительно) – менее 50% правильных ответов.

Критерии и шкалы оценки:

Оценка	Уровень освоения компетенции	Критерии оценивания
Отлично	Высокий уровень	Задача (задание) решена правильно, дано развернутое пояснение и обоснование сделанного заключения. Обучающийся демонстрирует методологические и теоретические знания, свободно владеет научной терминологией.
Хорошо	Достаточный уровень	Задача (задание) решена правильно, дано пояснение и обоснование сделанного заключения. Обучающийся

		демонстрирует методологические и теоретические знания, свободно владеет научной терминологией. Демонстрирует хорошие аналитические способности, однако допускает некоторые неточности при оперировании научной терминологией.
Удовлетворительно	Пороговый уровень	Задача (задание) решена правильно, пояснение и обоснование сделанного заключения было дано при активной помощи преподавателя. Обучающийся имеет ограниченные теоретические знания, допускает существенные ошибки при установлении логических взаимосвязей, допускает ошибки при использовании научной терминологии.
Неудовлетворительно	Критический уровень	Задача (задание) решена неправильно, обсуждение и помощь преподавателя не привели к правильному заключению. Обучающийся обнаруживает неспособность к построению самостоятельных заключений. Имеет слабые теоретические знания, не использует научную терминологию.

Список используемой литературы

основная

1. Березов, Т. Т. Биологическая химия : учебник / Березов Т. Т. , Коровкин Б. Ф. - 3-е изд. , стереотипное. - Москва : Медицина, 2008. - 704 с. (Учеб. лит. Для студентов мед. Вузов) - ISBN 5-225-04685-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5225046851.html>
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Белорус. наука, 2023. - 137 с. - ISBN 978-985-08-2970-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9789850829702.html>
3. Ребриков, Д. В. NGS : высокопроизводительное секвенирование / Д. В. Ребриков, Д. О. Коростин, Е. С. Шубина, В. В. Ильинский; под общ. ред. Д. В. Ребрикова. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 235 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-654-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001016540.html> (дата обращения: 03.09.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html>

дополнительная

1. Биоинжиниринг : молекулярно-генетические основы, синтетические методы : учеб. пособие / М. А. Наквасина, М. Г. Холявка, В. Г. Артюхов ; Воронежский государственный университет. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2021 – 164 с.
2. Выделение и очистка белка / Р.Х. Аюпов, М.М. Юсупов // Учебно-методическое пособие - 2015 - http://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/21918/01_12_000844.pdf [5.] Гоголева Н. Е. Подготовка образцов и нанопоровое секвенирование / Учебно-методическое пособие / Н.Е. Гоголева, Е.И Шагимарданова / - Казань: Казан. ун-т, 2022 – 28 с.
3. Соловьева В.В. Идентификация микроорганизмов с помощью молекулярно- генетического анализа нуклеотидной последовательности гена 16S рибосомной РНК. Методическое пособие / В.В. Соловьева, Т.В. Григорьева, А.А. Ризванов. - Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2011 - 44 с.

Программное обеспечение

Для образовательного процесса студенту необходимо рабочее место с ПК с установленным следующим программным обеспечением: операционная среда ОС Windows/Linux; MS Office.

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Электронно-библиотечные системы:

1.1. Цифровой образовательный ресурс IPRsmart : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа». - Саратов, [2024]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.2. Образовательная платформа ЮРАЙТ : образовательный ресурс, электронная библиотека : сайт / ООО Электронное издательство «ЮРАЙТ». – Москва, [2024]. - URL: <https://urait.ru> . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.3. База данных «Электронная библиотека технического ВУЗа (ЭБС «Консультант студента») : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Политехресурс». – Москва, [2024]. – URL: <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4x>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.4. Консультант врача. Электронная медицинская библиотека : база данных : сайт / ООО «Высшая школа организации и управления здравоохранением-Комплексный медицинский консалтинг». – Москва, [2024]. – URL: <https://www.rosmedlib.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.5. Большая медицинская библиотека : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Букап». – Томск, [2024]. – URL: <https://www.books-up.ru/ru/library/>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.6. ЭБС Лань : электронно-библиотечная система : сайт / ООО ЭБС «Лань». – Санкт-Петербург, [2024]. – URL: <https://e.lanbook.com>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.7. ЭБС Znanium.com : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Знаниум». - Москва, [2024]. - URL: <http://znanium.com> . – Режим доступа : для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

2. **КонсультантПлюс** [Электронный ресурс]: справочная правовая система. / ООО «Консультант Плюс» - Электрон. дан. - Москва : КонсультантПлюс, [2024].

3. **eLIBRARY.RU**: научная электронная библиотека : сайт / ООО «Научная Электронная Библиотека». – Москва, [2024]. – URL: <http://elibrary.ru>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный

4. **Федеральная государственная информационная система «Национальная электронная библиотека»** : электронная библиотека : сайт / ФГБУ РГБ. – Москва, [2024]. – URL: <https://нэб.рф>. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

5. Российское образование : федеральный портал / учредитель ФГАУ «ФИЦТО». – URL: <http://www.edu.ru>. – Текст : электронный.

6. Электронная библиотечная система УлГУ : модуль «Электронная библиотека» АБИС Мега-ПРО / ООО «Дата Экспресс». – URL: <http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Web>. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.