

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры биохимии
и биотехнологии
протокол № 14 от 26 мая 2017 г.
Зав. кафедрой Клобу /Р.Г. Фархутдинов

Согласовано:
Председатель УМК биологического
факультета

И.А. Шпирная /И.А. Шпирная

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
дисциплина Математические методы анализа структуры биомолекул

Вариативная часть

программа магистратуры

Направление подготовки (специальность)
06.04.01 Биология

Направленность (профиль) подготовки
Биохимия

Квалификация
Магистр

Разработчик (составитель):
доцент кафедры биохимии и
биотехнологии, к.б.н.

В.О. Цветков / В.О. Цветков

Для приема: 2017 г.

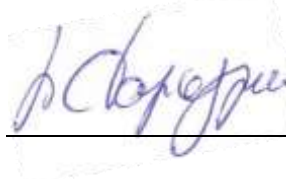
Уфа 2017 г.

Составитель: В.О. Цветков, кандидат биологических наук, доцент кафедры биохимии и биотехнологии

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры биохимии и биотехнологии, протокол № 14 от 26 мая 2017 г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры биохимии и биотехнологии: обновлены программное обеспечение, профессиональные баз данных и информационные справочные системы, протокол № 15 от 15 июня 2018 г.

Заведующий кафедрой



/ Р.Г. Фархутдинов

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры биохимии и биотехнологии: обновлены программное обеспечение, профессиональные баз данных и информационные справочные системы, протокол № 15 от 25 апреля 2019 г.

Заведующий кафедрой



/ Р.Г. Фархутдинов

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	6
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	6
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	6
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	8
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	16
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	17

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	Знать основные биологические законы, их историю и логику развития. Основные философские категории и специфику их применения при анализе поведения биологических объектов	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Знает основные биологические законы, их историю и логику развития
	Знать основные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	Знает основные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области
	Знать методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Знает методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований
Умения	Уметь применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при классификации живых систем и механизмов их функционирования	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Умеет применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при

			классификации живых систем и механизмов их функционирования
	Уметь решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ, анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	Умеет решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ, анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий
	Уметь: использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Умеет использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Владеет понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками
	Владеть основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	Владеет основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и

			терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных
	Владеть: навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Владеет: навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Математические методы анализа структуры биомолекул» относится к вариативной части.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 1 семестре.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, формируемые в рамках изучения следующих дисциплин: информатика, математика, физика, химия, биохимия.

Целью освоения дисциплины «Математические методы анализа структуры биомолекул» является формирование у студентов навыков эффективной работы с персональным компьютером и источниками информации, использования возможностей ЭВМ для решения профессиональных и прикладных задач, формирование как общей, так и информационной культуры личности.

В процессе изучения дисциплины «Математические методы анализа структуры биомолекул» обучающиеся должны использовать, обогащать и систематизировать фундаментальные знания по информатике, биологии, математике, физике. Изучение этого предмета является важным для формирования научного и эстетического мировоззрения. Студенты должны получить практические навыки для работы с оборудованием и программным обеспечением, используемым в различных отраслях образования, науки и производства. Воспитательное значение курса «Математические методы анализа структуры биомолекул» связано с его ролью в формировании научно-логического мировоззрения, познавательной активности студентов, а также общей и информационной культуры личности.

Для эффективного освоения данной дисциплины необходимы знания в области естественных и точных наук, а именно: информатики, математики, физики, химии, биохимии.

Обучающийся должен иметь представление о фундаментальных разделах биологии, математики, химии и физики. Эти знания будут способствовать осознанному восприятию о функционировании вычислительных машин и программного обеспечения.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу_____

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Незачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: основные биологические законы, их историю и логику развития. Основные философские категории и специфику их применения при анализе поведения биологических объектов	Не знает основные биологические законы, их историю и логику развития. Основные философские категории и специфику их применения при анализе поведения биологических объектов	Демонстрирует высокий уровень знания основных биологических законов, их истории и логики развития. Основных философских категорий и специфику их применения при анализе поведения биологических объектов
Второй этап (уровень)	Уметь: применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при классификации живых систем и механизмов их функционирования	Не умеет применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при классификации живых систем и механизмов их функционирования	Понимает и уверенно умеет применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при классификации живых систем и механизмов их функционирования

Третий этап (уровень)	Владеть: понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками	Не владеет понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками	Уверенно владеет понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками
------------------------	---	---	---

Код и формулировка компетенции ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Незачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: основные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области	Не знает основные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области	Демонстрирует высокий уровень знания учебного основных компьютерных технологий при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области

Второй этап (уровень)	Уметь: решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ, анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий	Не умеет решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ, анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий	Понимает и уверенно умеет решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ, анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий
Третий этап (уровень)	Владеть: основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных	Не владеет основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных	Уверенно владеет основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных

Код и формулировка компетенции **ПК-3 – способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)**

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Незачтено»	«Зачтено»
		Не знает (не ориентируется) Допускает грубые ошибки	Демонстрирует высокий уровень знаний

Первый этап (уровень)	Знать: методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований	Не знает методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований	Демонстрирует высокий уровень знаний методических основ проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований
Второй этап (уровень)	Уметь: использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач	Не умеет использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач	Понимает и уверенно умеет использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных	Не владеет навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных	Уверенно владеет навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных

Критериями оценивания являются оценки, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения разделов дисциплины. Система контроля за ходом и качеством усвоения студентами содержания данной дисциплины включает следующие виды:

текущий контроль – проводится систематически с целью установления уровня овладения студентами учебного материала в течение семестра. К формам текущего контроля относятся тесты. Выполнение этих работ является обязательным для всех студентов, а результаты являются основанием для допуска к следующим формам контроля.

промежуточный контроль – оценка уровня освоения материала по разделам дисциплины. В качестве форм контроля выступают контрольная работа, тестирования по материалам дисциплины.

итоговый контроль – оценка уровня освоения дисциплины по окончании ее изучения в форме зачета.

Шкалы оценивания:

«не зачтено» - магистрант не освоил программу дисциплины, плохо ориентируется в материале, допускает грубые ошибки, решает задачи с ошибками;

«зачтено» - магистрант демонстрирует базовые знания в области изучаемой дисциплины, хотя может допускать несущественные ошибки в толковании основных понятий.

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап Знания	Знать основные биологические законы, их историю и логику развития. Основные философские категории и специфику их применения при анализе поведения биологических объектов	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Тестирование, контрольная работа
	Знать основные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации, основные закономерности и современные достижения биологических наук, основанные на использовании компьютерных технологий, принципы хранения и обработки информации о биологических объектах и основное программное обеспечение в этой области	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	Тестирование, контрольная работа
	Знать методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Тестирование, контрольная работа
2-й этап Умения	Уметь применять основные приемы научного мышления при постановке экспериментов и оценке их результатов, применять основные приемы научного познания при классификации живых систем и механизмов их функционирования	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Тестирование, контрольная работа
	Уметь решать типичные задачи профессиональной деятельности на основе воспроизведения стандартных алгоритмов в статистических пакетах программ,	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные	Тестирование, контрольная работа

	анализировать результаты экспериментов с использованием современного программного обеспечения (в том числе — баз данных) и компьютерных технологий	технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	
	Уметь: использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии для решения обще профессиональных задач	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Тестирование, контрольная работа
3-й этап Владеть навыками	Владеть понятийным и терминологическим аппаратом теории научного познания: индукция и дедукция, анализ и синтез и т.д., приемами поиска, систематизации и классификации изучаемых событий живой природы, навыками работы с литературными источниками	ОК-1- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Тестирование, контрольная работа
	Владеть основными методами анализа биологических объектов, основанными на применении компьютерной техники, понятийным и терминологическим аппаратом используемых в трудовой деятельности пакетов программ и баз данных	ОПК-7 - готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач.	Тестирование, контрольная работа
	Владеть: навыками решения профессиональных задач, используя базовые теоретические положения и методы полевых, лабораторных и производственных исследований современной биологии, а также имеющиеся пакеты компьютерных программ и базы данных	ПК-3 - способность применять методические основы проектирования, выполнения полевых и лабораторных биологических, экологических исследований, использовать современную аппаратуру и вычислительные комплексы (в соответствии с направленностью (профилем) программы магистратуры)	Тестирование, контрольная работа

Изучение каждого раздела (модуля) дисциплины завершается промежуточным контролем в виде контрольной работы или тестирования, для текущего контроля используется тестирование.

Допуском к зачету является выполнение всех практических заданий, выполнение тестирования не менее, чем на 45% от максимального количества. В противном случае студенту необходимо заново подготовиться и пройти промежуточный контроль.

Вопросы к зачету по курсу «Математические методы анализа структуры биомолекул»

- 1 Способы описания первичной структуры белков и нуклеиновых кислот. Формат FASTA. Парное и множественное выравнивание.
- 2 Матрицы аминокислотных и нуклеотидных замен. Серии матриц PAM и BLOSUM, различия. Использование.
- 3 Оценка выравнивания. Счет выравнивания, штрафы. Линейный и аффинный штрафы за делецию. Биологический смысл.
- 4 Парное выравнивание. Точечные матрицы сходства. Фильтрация шума на матрицах. Интерпретация.
- 5 Парное выравнивание. Алгоритм Нидлмана - Вунша. Алгоритм Смита - Ватермана. Применение различных видов выравнивания.
- 6 Множественное выравнивание. Консенсусная последовательность и профиль выравнивания. Интерпретация результатов. Применение.
- 7 Эвристические алгоритмы множественного выравнивания. Алгоритм Clustal.
- 8 Оценка статистической достоверности выравнивания. Подход Bootstrap. Z-score, p-value, E-value, процент идентичности. Интерпретация.
- 9 Поиск гомологичных последовательностей. Алгоритм BLAST. Терминология. Параметры поиска.
- 10 Формат PDB. Структура файла. Программы для визуализации структур. Способы визуализации малых молекул и макромолекул (атомов, связей и вторичных структур).
- 11 Характеристика конформации молекулы. Обозначения торсионных углов полинуклеотида и полипептида. Карты Рамачандрана.
- 12 Виды филогенетических деревьев. Понятия и термины. Дерево как граф.
- 13 Матрицы расстояний. Евклидово расстояние. Способы определения расстояния между последовательностями.
- 14 Правила объединения групп. Формат Newick. Запись кладограмм и филограмм.
- 15 Принципы технологии секвенирования нового поколения. Ошибки секвенирования и их причины.
- 16 Математические основы сборки последовательности. Термины: чтение, контиг, скаффолд.
- 17 Формат FastQ.
- 18 Способы определения первичной структуры белка. MALDI-TOF. Принципы метода и получаемые данные.
- 19 Способы определения пространственной структуры белка. Метод ядерно-магнитного резонанса. Принципы метода и получаемые данные.
- 20 Рентгеноструктурный анализ. Принципы. Оценка качества структуры, полученной методом РСА.
- 21 Искусственные нейронные сети. Разновидности. Обучение. Применение.
- 22 Методы предсказания пространственной структуры РНК. Принципы и алгоритмы.
- 23 Методы предсказания пространственной структуры белка. Принципы и алгоритмы.
- 24 Буквенные обозначения вторичных структур белка.
- 25 Этапы разработки лекарственного препарата. Термины.
- 26 Принципы подбора лиганда в драг-дизайне. Фармакофор.
- 27 Докинг. Принципы. Учитываемые параметры. Оценочная функция докинга.
- 28 Проверка качества докинга. RMSD.

Примерные вопросы контрольной работы

1. Какое низкомолекулярное вещество присутствует в структуре 3ZHW? S04 - CO3 - CN4
2. В состав какой регулярной структуры входит аминокислотный остаток Asp61 белка 6PCY? Альфа-спирали - Бета-структуры - Никакой

3. Содержит ли белок с PDB ID 2CM4 дисульфидные связи? Сколько их?

Критерии оценки (в баллах):

За выполнение заданий контрольной работы студенту выставляются баллы в соответствии с учетом полноты выполнения задания, правильности полученных результатов и использованных методов.

**Пример текущих/рубежных тестов по дисциплине
«Математические методы анализа структуры биомолекул»**

1. Какие записи соответствуют формату FASTA?

- (1) > арабидопсис
MVNSNQNGNSNGHDDDFPQDSI
- (2) > 3QTD
> MVNSNQNGNSNGHDDDFPQDSI
- (3) > 3QTD
MVNSNQNGNSNGHDDDFPQDSI
- (4) > 3QTD
MVNSNQ
NQNGNS
NGHDDD
FPQDSI

2. Чему равно расстояние по Хэммингу между последовательностями **ASTSQ** и **QSTSA** ?

3. Чему равно расстояние по Левенштайну между последовательностями **ASTSQ** и **STSQA** ?

4. Какие две из четырех последовательностей наиболее сходны? Почему?

VLSDA VLSEA VLSQA VLSQF

5. Последовательность **DICLGASVSLTFEVC**I может принадлежать:

Альфа-спирали ; Бета-листу ;
Петле; Трансмембранному участку .

Объясните свое решение.

6. Напишите консенсусную последовательность для данного выравнивания.

**ELSAESVG
QLSAQSVG
QLAAESIG**

7. Вычислите счет выравнивания, если используется BLOSUM-62, штраф за открытие разрыва 8, за продолжение 1.

QLSA-SVG

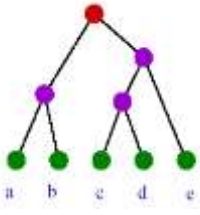
Q--AQSIG

Матрица BLOSUM62

Ala (A)	4																							
Arg (R)	-1	5																						
Asn (N)	-2	0	6																					
Asp (D)	-2	-2	1	6																				
Cys (C)	0	-3	-3	-3	9																			
Gln (Q)	-1	1	0	0	-3	5																		
Glu (E)	-1	0	0	2	-4	2	5																	
Gly (G)	0	-2	0	-1	-3	-2	-2	6																
His (H)	-2	0	1	-1	-3	0	0	-2	8															
Ile (I)	-1	-3	-3	-3	-1	-3	-3	-4	-3	4														
Leu (L)	-1	-2	-3	-4	-1	-2	-3	-4	-3	2	4													
Lys (K)	-1	2	0	-1	-3	1	1	-2	-1	-3	-2	5												
Met (M)	-1	-1	-2	-3	-1	0	-2	-3	-2	1	2	-1	5											
Phe (F)	-2	-3	-3	-3	-2	-3	-3	-3	-1	0	0	-3	0	6										
Pro (P)	-1	-2	-2	-1	-3	-1	-1	-2	-2	-3	-3	-1	-2	-4	7									
Ser (S)	1	-1	1	0	-1	0	0	0	-1	-2	-2	0	-1	-2	-1	4								
Thr (T)	0	-1	0	-1	-1	-1	-1	-2	-2	-1	-1	-1	-1	-2	-1	1	5							
Trp (W)	-3	-3	-4	-4	-2	-2	-3	-2	-2	-3	-2	-3	-1	1	-4	-3	-2	11						
Tyr (Y)	-2	-2	-2	-3	-2	-1	-2	-3	2	-1	-1	-2	-1	3	-3	-2	-2	2	7					
Val (V)	0	-3	-3	-3	-1	-2	-2	-3	-3	3	1	-2	1	-1	-2	0	-3	-1	4					
	A	R	N	D	C	Q	E	G	H	I	L	K	M	F	P	S	T	W	Y	V				

8. Для последовательностей GAATSC и GATTA рассчитайте оптимальное парное выравнивание с помощью алгоритма Нидлмана - Вунша. Используйте BLOSUM-62 и линейный штраф за делецию, равный 8. Сколько оптимальных выравниваний с равным счетом возможно в данном случае? Почему?

9. Напишите формулу, описывающую это дерево:



10. Дана матрица расстояний между четырьмя объектами:

	a	b	c	d
a	0	9	4	7
b	9	0	9	6
c	4	9	0	7
d	7	6	7	0

Этой матрице расстояний соответствует дерево, построенное методом ближайшего соседа, описываемое формулой:

(a,(b,(c,d))) ((a,(b,c)),d) (b,((a,c),d)) ((a,b),(c,d))

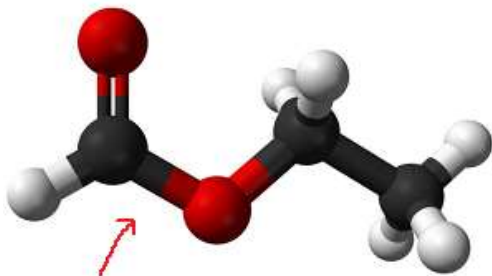
11. Рассчитайте евклидово расстояние между двумя организмами по четырем последовательностям. Расстояние считать по Хэммингу.

	Последовательность 1	Последовательность 2	Последовательность 3	Последовательность 4
Организм 1	QSDFAMGG	TYRMI	PLCVQWR	ASDFGHKL
Организм 2	QTNFAMGG	SYRMKL	AVCVQWR	ATDFGHRL

12. По трем последовательностям (a, b и c) постройте дерево методом одиночной связи. Расстояния считать по Хэммингу. Напишите формулу дерева с учетом расстояний.

- a AMFGRD
- b ALAGRD
- c MLLAKD

13. Торсионный угол вокруг связи, показанной стрелкой, равен:



- a. 0° ,
- б. 60° ,
- в. -60° ,
- г. 180° .

14. В молекуле белка всегда равен 180° градусам угол:

- a. φ ,
- б. ψ ,
- в. ω ,
- г. χ .

15. Моделирование пространственного взаимодействия молекул - это:

- a. Докинг,
- б. Фолдинг,
- в. Стэкинг,
- г. Дизайн.

Критерии оценки (в баллах):

За выполнение тестов студенту выставляются баллы в соответствии с полнотой и правильностью выполнения заданий.

Описание практических занятий

Занятие 1. Поиск и сравнение последовательностей

Работа 1. Поиск последовательностей

Работа 2. Парное выравнивание

Работа 3. Множественное выравнивание

Работа 4. Поиск и анализ гомологичных последовательностей

Занятие 2. Пространственные структуры биомолекул

Работа 1. Поиск структур и файлы PDB

Работа 2. Просмотр структур с использованием сервиса JSmol

Работа 3. Просмотр структур в программе DS Viewer Pro

Работа 4. Карты Рамачандрана и структурная организация белков

Занятие 3. Анализ белковых последовательностей

Работа 1. Анализ закономерностей формирования третичной структуры белка
Работа 2. Предсказание структуры белка

Занятие 4. Анализ нуклеотидных последовательностей и структур

Работа 1. Поиск рамки считывания в ДНК

Работа 2. Изучение структуры т-РНК

Работа 3. Предсказание вторичной структуры РНК

Занятие 5. Анализ белковых структур. Молекулярный дизайн

Работа 1. Поиск функционального центра молекулы белка

Работа 2. Анализ взаимодействий в комплексе

Работа 3. Дизайн и докинг

Занятие 6. Программирование и веб-дизайн

Работа 1. Веб-дизайн. HTML – язык разметки гипертекста

Работа 2. Основы программирования

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Сборник заданий по биоинформатике: учебное пособие / В.О. Цветков. - Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. [Электронный ресурс] Электронный читальный зал.

Дополнительная литература:

1. Биоинформатика : учебник для академического бакалавриата / В. Е. Стефанов, А. А. Тулуб, Г. Р. Мавропуло-Столяренко .— Москва : Юрайт, 2018 .— 252 с. (место хранения – аб 3, 34 экз.)

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

NCBI
ncbi.nlm.nih.gov

BLAST
blast.ncbi.nlm.nih.gov

Protein Data Bank
rcsb.org

European Bioinformatics Institute – EMBL
www.ebi.ac.uk

Discovery Studio Viewer
accelrys.com/products/collaborative-science/biovia-discovery-studio/visualization-download.php

Sequence Management Service
bioinformatics.org/sms2

Сервис просмотра и анализа структуры биомолекул

софт.биоуфа.рф/молекулы

Работа с регулярными выражениями
www.regexpal.com

Построение карт Рамачандрана
eds.bmc.uu.se/ramachan.html

Поиск ORF
ncbi.nlm.nih.gov/orffinder

Предсказание вторичной структуры РНК
rna.urmc.rochester.edu/RNAstructureWeb/Servers/Predict1/Predict1.html

Докинг
swissdock.ch/docking

Карты Рамачандрана: описание конформации белковой молекулы. Интерактивное дополнение к пособию
софт.биоуфа.рф/молекулы/Рамачандран.html

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

<i>Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий</i>	<i>Вид занятий</i>	<i>Наименование оборудования, программного обеспечения</i>
ауд. 232	помещение для проведения занятий лекционного типа	Мультимедиа-проектор PanasonicPT-LB78VE, экран настенный ClassicNorma 244*183
ауд. 332	помещение для проведения занятий лекционного типа	Мультимедиа-проектор PanasonicPT-LB78VE, экран настенный ClassicNorma 244*183
ауд. 319	учебная аудитория для проведения лабораторных работ	Учебная мебель, персональный компьютер в комплекте №1 iRUCorp – 15 шт
ауд. 231	учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации	Персональный компьютер в комплекте HPAiO 20"CQ 100 eu (моноблок) – 10 шт.
ауд. 428	помещение самостоятельной работы	Учебная мебель, доска, трибуна, мультимедиа-проектор InFocus IN119HDx, ноутбук Lenovo 550, экран настенный Classic Norma 200*200

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Математические методы анализа структуры биомолекул на 3 семестр
(наименование дисциплины)
Очная
форма обучения

Рабочую программу осуществляют:

Лекции: доцент, к.б.н. Цветков В.О.
(должность, уч. степень, ф.и.о.)

Практические занятия: доцент, к.б.н. Цветков В.О.
(должность, уч. степень, ф.и.о.)

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2/72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	10
практических/ семинарских	
лабораторных	12
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	49,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/ дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма контроля:
Зачет 3 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Модуль 1. Поиск и анализ последовательностей								
1	Сравнение последовательностей. Парное и множественное выравнивание.	3		4	12	Основная литература: 1-3 Дополнительная литература: 1-7	Подготовка к контрольной работе, тестированию. Основная лит-ра: 1-3 Доп. лит-ра: 1-7	Контрольная работа, тестирование
2	Банки данных биологической информации. Поиск.	2		2	12	Основная литература: 1-3 Дополнительная литература: 1-7	Подготовка к контрольной работе, тестированию. Основная лит-ра: 1-3 Доп. лит-ра: 1-7	Контрольная работа, тестирование
Модуль 2. Пространственные структуры макромолекул. Филогенетика								
3	Пространственные структуры макромолекул	3		4	12	Основная литература: 1-3 Дополнительная литература: 1-7	Подготовка к контрольной работе, тестированию. Основная лит-ра: 1-3 Доп. лит-ра: 1-7	Контрольная работа, тестирование
4	Филогенетика	2		2	14	Основная литература: 1-3 Дополнительная литература: 1-7	Подготовка к контрольной работе, тестированию. Основная лит-ра: 1-3 Доп. лит-ра: 1-7	Контрольная работа, тестирование
	Всего часов:	10		12	50			