



Інститут біоорганічної
хімії та нафтохімії
ім. В.П. Кухаря
НАН України

Е1 Біологія та біохімія

ДВА 2.04. Біоінформатика у біохімічних дослідженнях

Обсяг: 4 кредити ЄКТС

Семестри: IV, Рік:

Дні, Час, Місце: згідно розкладу

Інформація про викладача

К.б.н. Година Діана Миколаївна

Контакти

E-mail: dianahodyna@gmail.com, моб. тел. (098) 202 18 92

Робоче місце

Лабораторія медико-біологічних досліджень (к. 421)

Опис курсу

Мета: ознайомити із предметом, методами, підходами та галузями застосування біоінформатики для науково-практичних цілей, оперування базами даних та сучасними методами машинного навчання в біологічних дослідженнях, забезпечити отримання практичних навичок застосування *in silico* методів для пошуку, систематизації та аналізу біологічної інформації, передбачення фізико-хімічних та біологічних властивостей сполук різної природи, сформувати знання та вміння щодо розробки QSAR-моделей та дизайну матеріалів із заданими властивостями.

Завдання:

- навчити орієнтуватися в сучасних концепціях біоінформатики;
- ознайомити з сучасними інформаційними технологіями та методами в біології, роботою з біологічними та хімічними базами даних та основами аналізу біологічних даних;
- сформувати уявлення про загальні підходи щодо побудови математичних моделей біологічних процесів;
- навчити користуватися доступними пакетами комп'ютерних програм QSAR-моделювання біологічно активних речовин та прогнозування біологічних властивостей хімічних сполук різних класів;
- опанування способів раціонального комбінування віртуальних досліджень із відповідними експериментальними підходами.

У результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен
знати:

- ✓ основні принципи біоінформатики;
- ✓ прийоми та принципи пошуку спеціалізованої (біологічної та хімічної) інформації у глобальній мережі;
- ✓ основні концепції аналізу біологічних даних;
- ✓ основи організації біологічної інформації на молекулярному рівні;
- ✓ принципи пошуку і конструювання потенційно біоактивних сполук;
- ✓ методи побудови комп'ютерних моделей прогнозування біологічної активності та токсичності;
- ✓ особливості визначення біологічної активності хімічної сполуки відповідно до її структури.

вміти:

- ✓ систематизувати та аналізувати біологічні дані;
- ✓ працювати з електронними базами даних в галузі хімії і біології;
- ✓ обирати та застосовувати найбільш придатні методи математичного моделювання та оптимізації при проведенні наукового дослідження;
- ✓ користуватися доступними програмами пошуку та дизайну біологічно активних хімічних сполук;
- ✓ створювати комп'ютерні прогнозуючі моделі біологічної активності/токсичності сполук різної природи;
- ✓ проводити віртуальний скринінг сполук та робити висновки щодо їх хімічної модифікації;
- ✓ цілісно і системно мислити.

Форми і методи навчання

1. Лекції (із застосуванням мультимедійного обладнання). При читанні лекцій викладач орієнтує аспірантів на творче оволодіння матеріалом, дає настанови для наступної самостійної роботи з рекомендованою літературою. На лекції викладається лише узагальнені, вузлові питання навчальної дисципліни, методи й алгоритми розв'язання основних завдань.
2. Семінари розвивають творчу самостійність аспірантів, зміцнюють їх інтерес до науки і наукових досліджень. В процесі семінарських занять аспіранти опановують науковим апаратом, набувають навичок оформлення наукових робіт і опановують мистецтво усного та письмового викладу матеріалу.
3. Самостійна робота (аудиторна і позааудиторна) передбачає оволодіння аспірантом навчального матеріалу у час, вільний від обов'язкових навчальних занять.

Організація навчання

Назви модуля і теми дисципліни	Кіль-кіст ь кредитів ЄКТС	Обсяг навчальної роботи (в годинах)						Вид підсумкового контролю
		Заг аль ни й обс яг	Всь ого ауди тор них	Ле кц ії	Пр ак ти чн і	Се мі на ри	С а м о с ті й н а р о б о т а	
Модуль 1. Біоінформатика. Біоінформаційні бази даних. Комп’ютерне моделювання біологічно активних речовин.								
Тема 1. Вступ. Визначення, предмет досліджень, основні розділи та застосування біоінформатики. Первинні біологічні дані.	2	60	2	2	-	-	3	
Тема 2. Бази даних. Біологічні та хімічні бази даних. Банки даних.			7	3	-	4	14	

Тема 3. Комп'ютерне моделювання біологічно активних речовин. Методи побудови QSAR-моделей.			11	6	-	5	23	
Модуль 2. Прогнозування біологічних властивостей хімічних сполук.								
Тема 4. OCHEM база даних у дослідженнях <i>in silico</i>	2	60	4	2	-	2	10	
Тема 5. OCHEM - інтернет платформа для зберігання даних, використання та розробки QSAR-моделей			12	7	-	5	22	
Тема 6. Передбачення ADME/Tox властивостей			4	2	-	2	8	
РАЗОМ	4	120	40	22	-	18	80	Екзамен

Політика курсу

Відвідування та / або участь є важливим компонентом курсу. Прослуховування лекцій та приймання участі в обговоренні на семінарських заняттях.

Академічна доброчесність та плагіат. Підготовка індивідуальних завдань з використанням інформаційних джерел без посилань на них є плагіатом і несе академічну відповідальність.

Мобільні пристрої на заняттях використовуються тільки з дозволу викладача.

Поведінка в аудиторії, лабораторії. Під час аудиторних занять аспірант додержується правил з техніки безпеки у хімічній лабораторії, навчальній аудиторії, комп'ютерному класі.

Форми контролю включають обов'язкове відвідування, вчасне та якісне виконання завдань відповідно до поставленої задачі.