



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Bioinformatyka strukturalna

Przedmiot

Kierunek studiów

Bioinformatyka

Studia w zakresie (specjalność)

Poziom studiów

drugiego stopnia

Forma studiów

stacjonarne

Rok/semestr

1/2

Profil studiów

ogólnoakademicki

Język oferowanego przedmiotu

polski

Wymagalność

obligatoryjny

Liczba godzin

Wykład

15

Ćwiczenia

Laboratoria

15

Projekty/seminaria

Inne (np. online)

Liczba punktów ECTS

3

Wykładowcy

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

prof. dr hab. inż. Marta Szachniuk

Wydział Informatyki i Telekomunikacji

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

Wymagania wstępne

Osoba podejmująca studia na II stopniu Bioinformatyki powinna mieć osiągnięte efekty kształcenia z I stopnia tego kierunku studiów, zdefiniowane w Uchwale Senatu PP – efekty te prezentowane są w serwisie internetowym Wydziału Informatyki i Telekomunikacji.

Student rozpoczynający niniejszy moduł powinien posiadać podstawową wiedzę o biologii strukturalnej, teorii algorytmów, programowaniu, bazach danych oraz algorytmach kombinatorycznych. Powinien posiadać umiejętność rozwiązywania podstawowych problemów z zakresu programowania i analizy danych biologicznych.

Ponadto w zakresie kompetencji społecznych student winien prezentować takie postawy jak uczciwość, odpowiedzialność, wytrwałość, ciekawość poznawcza, kreatywność, kultura osobista, szacunek dla innych ludzi.

Cel przedmiotu

1. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy o algorytmach i metodach optymalizacji stosowanych do rozwiązywania podstawowych problemów współczesnej biologii i bioinformatyki strukturalnej RNA oraz



o najlepszych narzędziach umożliwiających magazynowanie, przetwarzanie, analizę i pozyskiwanie danych biologicznych.

2. Zapoznanie studentów z architekturą najpopularniejszych narzędzi stosowanych w bioinformatyce strukturalnej, zarówno prekursorskich, jak i tych stosowanych dziś. Nacisk położony jest na wady i zalety stosowanych rozwiązań, ich ograniczenia (których zazwyczaj nie są świadomi użytkownicy tych systemów), wykorzystywane technologie, jakość otrzymywanych rozwiązań, ich wiarygodność oraz sposoby weryfikacji wyników.

3. Rozwinięcie u studentów umiejętności matematycznego modelowania problemów biologii strukturalnej, rozwiązywania problemów obliczeniowych w biologii strukturalnej RNA przy pomocy zarówno prostych, jak i zaawansowanych algorytmów bioinformatycznych, oraz umiejętności testowania nowych metod obliczeniowych.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza

1. Ma rozszerzoną i pogłębioną wiedzę na temat modeli matematycznych stosowanych do reprezentowania struktury cząsteczek kwasów nukleinowych na różnym poziomie szczegółowości.
2. Zna metody, techniki i narzędzia wykorzystywane w procesie rozwiązywania złożonych zadań z zakresu analizy struktur RNA, głównie o charakterze inżynierskim.
3. Zna architekturę oraz szczegóły funkcjonalności najpopularniejszych strukturalnych repozytoriów danych oraz algorytmów wspomagających obliczenia strukturalne (przewidywanie struktur, rozwiązywanie struktur, ewaluacja i porównywanie struktur, klastrowanie, etc).
4. Zna zagadnienia z zakresu modelowania i analizy struktur biologicznych oparte na solidnych podstawach teoretycznych.
5. Ma szczegółową wiedzę na temat modelowania procesów przewidywania, modelowania i porównywania struktur molekularnych.
6. Ma opartą na solidnych podstawach teoretycznych szczegółową wiedzę na temat optymalizacji i efektywnych algorytmów wykorzystywanych w bioinformatyce strukturalnej RNA. Zna działanie szeregu najważniejszych historycznie i najpopularniejszych algorytmów do przewidywania i obliczania struktur, znajdowania wspólnych podstruktur, dopasowywania struktur.
7. Wie, w jakim kierunku rozwijają się metody obliczeniowe dla istotnych w biologii strukturalnej problemów wymagających wspomaganie algorytmicznego oraz jakie metody proponuje się dla nowych problemów w bioinformatyce strukturalnej.

Umiejętności

1. Wykorzystuje i interpretuje informacje pozyskane z literatury dotyczącej ogólnych problemów bioinformatyki strukturalnej RNA, jak i źródeł specjalistycznych (publikacji naukowych w czasopismach typu Bioinformatics, BMC Bioinformatics, Nucleic Acids Research, itp.; serwisów i portali internetowych z dziedziny). Dokonuje interpretacji i krytycznej oceny treści.



2. Stosuje zaawansowane techniki i narzędzia informatyczne (np. GenBank, BLAST, RNA FRABASE, FARFAR, ModeRNA, RNAComposer, RNAstructure, Eterna, mfold, RNAfold, RNAinverse) do rozwiązywania problemów biologicznych i potrafi ocenić ich przydatność.
3. Pod kierunkiem opiekuna naukowego planuje i wykonuje zadania badawcze (np. modelowanie struktury z wykorzystaniem narzędzi bioinformatycznych, ocena jakości modeli RNA, klastrowanie struktur na podstawie ich podobieństw i różnic) z wykorzystaniem poznanych metod obliczeniowych.
4. Potrafi projektować i tworzyć oprogramowanie komputerowe do rozwiązywania wybranych problemów bioinformatyki strukturalnej używając właściwych metod, technik i narzędzi.
5. Przygotowuje w języku polskim i angielskim prezentację wyników swoich prac badawczych (sprawozdania, prezentacje z wykonania projektu) oraz dyskutuje wyniki tych badań w środowisku naukowym.
6. Potrafi ocenić przydatność nowych osiągnięć w zakresie bioinformatyki strukturalnej, zwłaszcza w przetwarzaniu i analizie danych strukturalnych.

Kompetencje społeczne

1. Rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie (na zajęciach przedstawiane są najnowsze osiągnięcia w dziedzinie bioinformatyki strukturalnej; również student ma możliwość prezentacji tematu dotyczącego najnowszych problemów i ich rozwiązań).
2. Potrafi współdziałać i pracować w grupie (okazją do praktykowania pracy grupowej są zajęcia laboratoryjne z przedmiotu).
3. Rozumie potrzebę systematycznego zapoznawania się z czasopismami naukowymi i popularnonaukowymi w celu poszerzania i pogłębiania wiedzy bioinformatycznej
4. Wykazuje twórczą postawę w życiu zawodowym i społecznym.

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Ocena formująca

- a) w zakresie wykładów weryfikowanie założonych efektów kształcenia realizowane jest przez:
 - odpowiedzi na pytania dotyczące materiału omówionego na poprzednich wykładach
- b) w zakresie laboratoriów weryfikowanie założonych efektów kształcenia realizowane jest przez:
 - ocenę przygotowania studenta do poszczególnych sesji zajęć laboratoryjnych (sprawdzian „wejściowy”) oraz ocenę umiejętności związanych z realizacją ćwiczeń laboratoryjnych
 - ocenianie ciągłe, na każdym zajęciach (odpowiedzi ustne) – premiowanie przyrostu umiejętności posługiwania się poznanymi zasadami i metodami



- ocenę sprawozdań przygotowywanych częściowo w trakcie zajęć, a częściowo po ich zakończeniu; ocena ta obejmuje także umiejętność pracy w zespole
- ocenę i „obronę” zrealizowanych przez studenta ćwiczeń laboratoryjnych

Ocena podsumowująca

a) w zakresie wykładów weryfikowanie założonych efektów kształcenia realizowane jest przez:

- ocenę wiedzy i umiejętności wykazanych na egzaminie pisemnym, składającym się z 5 pytań (po 3 punkty za pytanie). 20% pytań ma charakter testu wielokrotnego wyboru, a pozostała część ma charakter problemowy. Wszystkie pytania egzaminacyjne dotyczą zagadnień omówionych podczas wykładów oraz zajęć laboratoryjnych. Pozytywne zaliczenie egzaminu jest możliwe jeśli student uzyska łącznie co najmniej 8 punktów.
- omówienie wyników egzaminu

b) w zakresie laboratoriów weryfikowanie założonych efektów kształcenia realizowane jest przez:

- ocenę wiedzy i umiejętności związanych z treściami przekazywanymi na ćwiczeniach poprzez kolokwium końcowe
- zestawienie ocen wystawionych w trakcie semestru w postaci średniej ważonej, w skład której wchodzi oceny cząstkowe wystawiane za wykonane projekty, sprawozdania oraz aktywność wykazaną podczas zajęć.

Aktywność podczas zajęć premiowana jest dodatkowymi punktami, w szczególności za:

- omówienie dodatkowych aspektów zagadnienia,
- przygotowanie krótkiej prezentacji dotyczącej problemu z zakresu bioinformatyki strukturalnej nieprezentowanego przez wykładowcę,
- efektywność zastosowania zdobytej wiedzy podczas rozwiązywania zadanego problemu,
- uwagi prowadzące do udoskonalenia materiałów dydaktycznych lub procesu dydaktycznego.

Treści programowe

Program wykładu obejmuje następujące zagadnienia. Pierwszy wykład jest ogólnym wykładem wprowadzającym w temat, przedstawione są na nim kluczowe zagadnienia współczesnej bioinformatyki strukturalnej RNA wraz z proponowanymi rozwiązaniami i ich charakterystyką pod kątem wymagań, ograniczeń, złożoności obliczeniowej. Drugi wykład jest wprowadzeniem do baz danych gromadzących informacje o strukturach cząsteczek RNA. Na wykładzie studenci poznają kilka najpopularniejszych repozytoriów strukturalnych, wraz ze schematami danych, architekturą baz, aplikacjami obsługującymi interakcję z użytkownikiem, metajęzykami zdefiniowanymi na potrzeby tworzenia skomplikowanych



zapytań do omawianych narzędzie oraz formatami danych wykorzystywanymi do zapisu struktury. Kolejny wykład przeznaczony jest na najpopularniejsze modele i formaty zapisu struktury drugorzędowej RNA, motywy strukturalne oraz metody ich wizualizacji. Na wykładzie omawia się metodykę modelowania matematycznego danych i problemów strukturalnych, z uwzględnieniem optymalizacji pod kątem dalszej analizy tych problemów oraz biorąc pod uwagę kompletność modelowanych informacji. Czwarty wykład nawiązuje do podstawowych metod przewidywania struktury drugorzędowej. Przedstawione są na nim historycznie pierwsze algorytmy przewidywania (dokładne omówienie działania tych metod na konkretnych przykładach) oraz wybrane współczesne metody przewidywania struktury drugorzędowej. W ramach kolejnego wykładu omówione są podstawowe podejścia do modelowania struktur przestrzennych. Przedstawiona jest ogólna charakterystyka podejść, ich wady, zalety oraz użyteczność, oraz omówione są wybrane współczesne metody modelowania struktur 3D RNA. Szósty wykład poświęcony jest algorytmom porównywania danych strukturalnych, wyszukiwania podobieństw, miar podobieństwa, miar odległościowych, klastrowania danych. Podane są przykłady zastosowania konkretnych miar odległościowych (dla struktur na różnym poziomie szczegółowości) oraz przedstawione podstawowe wykorzystywane współcześnie narzędzia do porównywania i analizy struktur. Podczas kolejnego wykładu omawiany jest temat wizualizacji danych w bioinformatyce. Przedstawione są podstawowe zagadnienia związane z grafiką komputerową oraz metody wizualizacji wykorzystywane w najpopularniejszych narzędziach bioinformatycznych. Ostatni wykład przeznaczony jest na prezentacje studentów, podczas których dwuosobowe grupy studentów przedstawiają wybrane przez siebie najnowsze problemy bioinformatyki strukturalnej.

Ćwiczenia laboratoryjne związane są ściśle z tematyką wykładów. Wykład stanowi wprowadzenie teoretyczne. Podczas ćwiczeń laboratoryjnych studenci uczą się praktycznego wykorzystania narzędzie omawianych podczas wykładu oraz implementują własne metody do rozwiązywania prostych problemów bioinformatycznych.

Ćwiczenia laboratoryjne prowadzone są w formie siedmiu dwugodzinnych zajęć odbywających się w laboratorium komputerowym. Zadania do samodzielnego wykonania mają praktyczny charakter i przygotowują do wykorzystania dostępnych narzędzi i bibliotek programistycznych. Dodatkowo w czasie trwania semestru, studenci podzieleni na zespoły dwuosobowe przygotowują projekty (częściowo podczas zajęć, częściowo w ramach pracy własnej) rozwiązujące wybrane kombinatoryczne problemy mające zastosowanie w biologii strukturalnej. Program zajęć laboratoryjnych obejmuje następujące zagadnienia. Na pierwszych ćwiczeniach studenci poznają empirycznie powszechnie stosowane w bioinformatyce bazy danych RNA. Celem jest poznanie wzajemnych powiązań między nimi oraz nauka konstrukcji zaawansowanych zapytań. Samodzielnie trzeba tworzyć mniej i bardziej skomplikowane zapytania oraz przygotowywać rozwiązanie do zdalnego dostępu do wyników. Następnym tematem są struktury drugorzędowe RNA. Podczas ćwiczeń studenci poznają dostępne narzędzia do parsowania i wizualizacji struktur drugorzędowych. Zadaniem praktycznym jest stworzenie własnego oprogramowania do czytania tych formatów oraz analizy informacji o drugorzędowej strukturze cząsteczek biologicznych. Jest to wstęp do kolejnego tematu, który dotyczy klasycznych metod predykcji struktury drugorzędowej przy użyciu algorytmów programowania dynamicznego. Własna implementacja omówionych metod jest zadaniem projektowym, które studenci wykonują w ramach zaliczenia tego tematu. Kolejnym tematem jest modelowanie struktur trzeciorzędowych, analiza jakości wyników oraz



metody porównywania struktur. Studenci poznają dostępne narzędzia, miary podobieństwa i jakości oraz algorytmy do wzajemnej oceny struktur. W ramach zajęć laboratoryjnych studenci wykonują zadania związane z tematem (wykorzystując gotowe, dostępne narzędzia), przeprowadzają szereg eksperymentów obliczeniowych (od predykcji struktury z różnymi parametrami wejściowymi, po analizę wyników), a wyniki tych prac podsumowują w formie raportu. Następnym tematem jest wizualizacja struktur. Ćwiczenia laboratoryjne są poświęcone poznaniu działania powszechnie stosowanych narzędzi i ich możliwości. Na przedostatnich zajęciach studenci poznają biblioteki programistyczne do pracy ze strukturami trzeciorzędowymi. Omówione zostaną najważniejsze biblioteki dla różnych języków programowania powiązane z przykładami ich użycia dla rzeczywistych danych. Ostatnie zajęcia poświęcone są analizie trajektorii z zapisów symulacji dynamiki molekularnej. Przedstawione są tu formaty zapisu danych i metody dostępu do nich. Zadaniem studenta jest stworzenie prostego projektu, w którym możliwości analizy struktur poznane wcześniej mogą być wykorzystane w celu przetworzenia zapisanych trajektorii.

Metody dydaktyczne

1. Wykład: prezentacja multimedialna, prezentacja ilustrowana przykładami podawanymi na tablicy, pokaz multimedialny.
2. Ćwiczenia laboratoryjne: rozwiązywanie zadań, ćwiczenia praktyczne, wykonywanie eksperymentów obliczeniowych, dyskusja, praca w zespole, pokaz multimedialny, warsztaty, gry integracyjne, studium przypadków.

Literatura

Podstawowa

1. J. Gu, P.E. Bourne, "Structural Bioinformatics"
2. P. Baldi, S. Brunak, "Bioinformatics: The Machine Learning Approach"
3. T. Schwede, M. Peitsch, "COmputational structural biology. Methods and applications."

Uzupełniająca

Najnowsze publikacje naukowe z dziedziny bioinformatyki strukturalnej.

Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	75	3,0
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	30	1,5
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu) ¹	45	1,5

¹ niepotrzebne skreślić lub dopisać inne czynności