KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu
Bioinformatyka strukturalna [S1Bioinf1>BSTR]

Przedmiot

Kierunek studiów
Bioinformatyka

Rok/Semestr
3/5

Studia w zakresie (specjalność)
–

Profil studiów
ogólnoakademicki

Poziom studiów
pierwszego stopnia

Język oferowanego przedmiotu
polski

Forma studiów
stacjonarne

Wymagalność
obligatoryjny

Liczba godzin

Wykład
15

Laboratorium
30

Inne
0

Ćwiczenia
0

Projekty/seminaria
0

Liczba punktów ECTS

4,00

Koordynatorzy

dr hab. inż. Maciej Antczak prof. PP
maciej.antczak@put.poznan.pl

Wykładowcy

Wymagania wstępne

Student rozpoczynający ten moduł powinien posiadać podstawową wiedzę z zakresu biologii molekularnej oraz umiejętności w zakresie wykorzystywania serwerów obliczeniowych oraz baz danych udostępnionych w Internecie, programowania w języku Python, projektowania stosunkowo prostych algorytmów oraz wersjonowania kodów źródłowych z wykorzystaniem narzędzia Git (np. na platformie GitHub). Ponadto powinien prezentować takie postawy jak uczciwość, wytrwałość, kreatywność i szacunek dla innych ludzi. W końcu powinien posiadać umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł często w języku angielskim.

Cel przedmiotu

Celem przedmiotu jest zapoznanie studenta z podstawowymi pojęciami oraz szeroko wykorzystywanymi algorytmami, metodami obliczeniowymi oraz bazami danych stosowanymi podczas badania, analizy i interpretacji struktur cząsteczek biologicznych. W szczególności obejmuje to: 1. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy w zakresie bioinformatyki strukturalnej ze szczególnym uwzględnieniem metod obliczeniowych i algorytmów przewidywania, analizy, wizualizacji oraz porównywania struktur molekularnych. 2. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy o specjalizowanych bazach danych przechowujących informacje o strukturach cząsteczek biologicznych dostępnych Internecie oraz wykształcenie w nich umiejętności ich praktycznego wykorzystania. 3. Wykształcenie u studentów umiejętności definiowania najwłaściwszych ścieżek postępowania, podczas których analizowane są i interpretowane dostępne dane strukturalne, w celu znalezienia odpowiedzi w ramach rozważanego problemu badawczego. 4. Nabycie przez studentów umiejętności tworzenia programów, które z powodzeniem korzystają z interfejsów programistycznych (API) szeroko wykorzystystwanych baz danych oraz serwerów obliczeniowych oraz zabezpieczania ich przed niedostępnością zewnętrznych zasobów. 5. Wykształcenie u studentów podstawowych umiejętności w zakresie modelowania homologicznego, dynamiki molekularnej oraz dokowania struktur białek.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:
W wyniku przeprowadzonych zajęć student:
1. Zna i rozumie podstawowe własności cząsteczek biologicznych oraz procesy biologiczne, które zachodzą z ich udziałem, a ich interpretację opiera na podstawach empirycznych, wykorzystując do tego celu metody matematyczne, w tym statystyczne oraz uczenia maszynowego.
2. Zna i rozumie zagadnienia z zakresu fizyki przydatne do formułowania i rozwiązywania prostych problemów bioinformatycznych, obejmujące podstawowe własności struktur molekularnych oraz ich hierarchiczną organizację, które są kluczowe podczas analizy zachodzących interakcji międzycząteczkowych.
3. Zna i potrafi zastosować podstawowe metody, algorytmy i narzędzia w celu projektowania i wytwarzania oprogramowania dedykowanego integracji oraz interpretacji danych molekularnych w procesie rozwiązywania zadań bioinformatycznych.
4. Zna i rozumie podstawowe zagadnienia z zakresu bioinformatyki strukturalnej dotyczące między innymi modelowania i dokowania molekularnego.

Umiejętności:
W wyniku przeprowadzonych zajęć student:
1. Potrafi pozyskiwać informacje z literatury naukowej, specjalizowanych baz danych przechowujących informacje o strukturach molekularnych oraz innych właściwie dobranych źródeł np. repozytoria otwartego oprogramowania, opublikowane na platformie GitHub, udostępniające algorytmy i narzędzia rozwiązujące problemy bioinformatyki strukturalnej.
2. Potrafi integrować różnorodne dane biologiczne i interpretować uzyskane na ich podstawie informacje, a także trafnie wnioskować oraz formułować i uzasadniać swoje opinie na podstawie rezultatów przeprowadzonych eksperymentów obliczeniowych.
3. Potrafi projektować oraz wytwarzać specjalizowane przepływy danych integrujące szeroko stosowane bazy danych oraz serwery obliczeniowe w celu rozwiązywania problemów inspirowanych zastosowaniami biologicznymi oraz ewaluować ich obliczeniową wydajność oraz praktyczną użyteczność.
4. Potrafi stosować podstawowe techniki i narzędzia informatyczne podczas projektowania algorytmów oraz wytwarzania oprogramowania dedykowanego przewidywaniu oraz analizie struktur cząsteczek biologicznych.

Kompetencje społeczne:
W wyniku przeprowadzonych zajęć student:
1. Dostrzega potrzebę ciągłego dokształcania się oraz podnoszenia własnych kompetencji w zakresie bioinformatyki strukturalnej.
2. Potrafi funkcjonować i współdziałać w grupie, przyjmując w niej różne role oraz potrafi odpowiednio określać priorytety służące realizacji określonego przez siebie lub innych zadania.
3. Praktyczny charakter przedmiotu pozwala studentowi rozwijać umiejętności przedsiębiorczego działania.

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Wiedza i umiejętności zdobyte w ramach kursu (obejmującego zarówno wykład jak i laboratorium) są weryfikowane za pomocą 60-minutowego egzaminu przeprowadzonego w sesji, który studenci rozwiązują samodzielnie. Egzamin składa się z około 20 pytań (testowych i otwartych, o zróżnicowanej liczbie punktów). Próg zaliczeniowy: 50% punktów.
Umiejętności nabyte w ramach ćwiczeń laboratoryjnych weryfikowane są na podstawie ocen cząstkowych uzyskanych z realizowanych podczas zajęć mini-projektów. W celu uzyskania zaliczenia laboratorium konieczne jest zaliczenie każdego z mini-projektów, a ocena końcowa jest średnią uzyskanych ocen cząstkowych.

Treści programowe

Program wykładu obejmuje następujące zagadnienia:
* centralny dogmat biologii molekularnej,
* strukturalna i funkcjonalna analiza cząsteczek biologicznych,
* hierarchiczna organizacja strukturalna białek i kwasów nukleinowych,
* analiza jakości struktur 3D cząsteczek biologicznych, szeroko wykorzystywane miary oceny,
* popularne narzędzia do wizualizacji struktur przestrzennych cząsteczek biologicznych.

Ćwiczenia laboratoryjne prowadzone są w formie piętnastu dwugodzinnych zajęć odbywających się w laboratorium komputerowym. W trakcie zajęć laboratoryjnych studenci realizują indywidualnie lub w grupach dwuosobowych 6-7 mini-projektów związanych z bioinformatyką strukturalną. Projekty mają charakter praktyczny i obejmują zaimplementowanie stosunkowo prostych skryptów służących do rozwiązywania wskazanych problemów oraz przeprowadzania niezbędnych eksperymentów.

Tematyka zajęć

Program wykładu obejmuje następujące zagadnienia:
* podstawowe informacje o realizowanym kursie oraz metodach jego zaliczenia,
* podstawowe terminy i pojęcia skojarzone z bioinformatyką strukturalną cząsteczek biologicznych,
* centralny dogmat biologii molekularnej (DNA, RNA, białko),
* strukturalna i funkcjonalna analiza cząsteczek biologicznych,
* hierarchiczna organizacja strukturalna białek i kwasów nukleinowych,
* struktura pierwszorzędowa: chemiczne własności aminokwasów, format FASTA, lokalne/globalne dopasowanie sekwencyjne i odpowiadające mu algorytmy, macierze substytucji, PSI-BLAST,
* geometria łańcucha polipeptydowego, kąti Phi/Psi, wykres Ramachandrana, kowalencyjne i niekowalencyjne wiązania chemiczne w białkach,
* struktura drugorzędowa: wiązania wodorowe, ekstrakcja struktury drugorzędowej na podstawie struktury przestrzennej (np. DSSP), metody przewidywania struktury drugorzędowej , mapy kontaktów,
* struktura trzeciorzędowa: eksperymentalne metody określania struktur przestrzennych cząsteczek biologicznych, formaty: PDBx/mmCIF oraz PDB, definicja problemu fałdowania białek na podstawie sekwencji, związek pomiędzy strukturą przestrzenną, a pełnioną funkcją cząsteczki w komórce, automatyczne metody przewidywania struktur 3D cząsteczek biologicznych, modelowanie homologiczne białek (np. MODELLER), dynamika molekularna (np. GROMACS),
* klasyfikacja struktur przestrzennych białek (np. SCOP, CATH),
* struktura czwartorzędowa,
* podejścia służące strukturalnemu dopasowywaniu białek i RNA,
* analiza jakości struktur 3D cząsteczek biologicznych, szeroko wykorzystywane miary oceny: np. RMSD, GDT_TS,
* najbardziej popularne narzędzia do wizualizacji struktur przestrzennych cząsteczek biologicznych: np. LiteMol, JSMol, Mol* (różne sposoby prezentacji struktury: np. Cartoon, Ball and Stick),
* szeroko wykorzystywane repozytoria przechowujące struktury przestrzenne cząsteczek biologicznych oraz skojarzone z nimi dodatkowe dane (np. Protein Data Bank, ASTRAL, UniProt),
* przegląd najbardziej popularnych serwerów obliczeniowych rozwiązujących kluczowe problemy

bioinformatyki strukturalnej (np. I-TASSER),
* kompleksy białkowe oraz szeroko stosowane podejścia do dokowania molekularnego (np. HADDOCK),
* biblioteki wspierające wytwarzanie oprogramowania dedykowanego analizie i przetwarzaniu struktur cząsteczek biologicznych (np. biopython).
Ćwiczenia laboratoryjne prowadzone są w formie piętnastu dwugodzinnych zajęć odbywających się w laboratorium komputerowym. W trakcie zajęć laboratoryjnych studenci realizują indywidualnie lub w grupach dwuosobowych 6-7 mini-projektów związanych z bioinformatyką strukturalną. Projekty mają charakter praktyczny i obejmują zaimplementowanie stosunkowo prostych skryptów służących do rozwiązywania wskazanych problemów oraz przeprowadzania niezbędnych eksperymentów. Na realizację każdego projektu studenci otrzymają 2-3 tygodnie w zależności od stopnia jego złożoności. Postępy w pracach są sprawdzane na bieżąco przez prowadzącego podczas zajęć. Lista proponowanych projektów jest udostępniana przed rozpoczęciem semestru oraz cyklicznie aktualizowana stosownie do aktualnego stanu rozwoju bioinformatyki strukturalnej.

Metody dydaktyczne

1. Wykład: prezentacja multimedialna uzupełniana w razie potrzeby dodatkowymi przykładami prezentowanymi na tablicy.
2. Ćwiczenia laboratoryjne: ćwiczenia praktyczne przy komputerze realizowane według określonego scenariusza, implementacja stosunkowo prostych programów oraz usług sieciowych, projektowanie oraz przeprowadzanie eksperymentów obliczeniowych oraz analiza uzyskanych wyników, dyskusja zastosowanych rozwiązań i prezentacja uzyskanych wyników.

Literatura

Podstawowa
1. A. M. Lesk, "Wprowadzenie do bioinformatyki", 2020, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa.
2. J. Xiong, "Podstawy bioinformatyki", 2009, Wydawnictwa Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa.
3. A. D. Baxevanis i B. F. F. Ouellette, "Bioinformatyka : podręcznik do analizy genów i białek", 2005, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa.
Uzupełniająca
1. J. Gu, P. E. Bourne, "Structural Bioinformatics", 2019, Wiley-Blackwell; 2nd edition.
2. I. Eidhammer,W. R. Taylor,J. Inge, "Protein Bioinformatics", 2009, Wiley India Pvt Ltd; 1st edition.
3. M. Gromiha, "Protein Bioinformatics: From Sequence to Function", 2010, Academic Press; 1st edition.
4. C. Setubal, J. Meidanis, "Introduction to Computational Biology", 1997, PWS Publishing; 1st edition.
4. A. M. Lesk, "Introduction to Protein Architecture: The Structural Biology of Proteins", 2001, Oxford University Press; 1st edition.
5. S.L. Salzberg, D.B. Searls, S. Kasif, "Computational Methods in Molecular Biology", 1998, Elsevier Science.

Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	100	4,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	45	2,00
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwiów/egzaminu, wykonanie projektu)	55	2,00