

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Биоинформатика

Код модуля
1161171(1)

Модуль
Теоретические и практические подходы в химии
и биотехнологии

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Буторин Илья Игоревич	без ученой степени, без ученого звания	Старший преподаватель	Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий

Согласовано:

Управление образовательных программ

С.А. Иванченко

Авторы:

- **Буторин Илья Игоревич, Старший преподаватель, Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Биоинформатика

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Практические/семинарские занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Зачет	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	1
		Домашняя работа	1

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Биоинформатика

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности З-2 - Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности П-1 - Решать самостоятельно сформулированные	Домашняя работа Зачет Контрольная работа Практические/семинарские занятия

	<p>практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>У-2 - Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p>	
<p>ОПК-3 -Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов</p>	<p>З-4 - Перечислить основные нормативные документы, регламентирующие оформление научно-технических отчетов и защиту прав интеллектуальной собственности</p> <p>П-2 - Оформить научно-технический отчет, публикацию научных результатов, документы защиты интеллектуальной собственности в соответствии с нормативными требованиями</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>У-3 - Оценивать оформление научно-технических отчетов, публикаций научных результатов, документов защиты интеллектуальной собственности на соответствие нормативным требованиям</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Зачет</p> <p>Контрольная работа</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

<p>УК-1 -Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов У-3 - Анализировать проблемную ситуацию, выявлять и определять способы ее разрешения</p>	<p>Домашняя работа Зачет Контрольная работа Практические/семинарские занятия</p>
<p>УК-7 -Способен обрабатывать, анализировать, передавать данные и информацию с использованием цифровых средств для эффективного решения поставленных задач с учетом требований информационной безопасности</p>	<p>З-1 - Сделать обзор угроз информационной безопасности, основных принципов организации безопасной работы в информационных системах и в сети интернет З-2 - Описать способы и средства защиты персональных данных и данных в организации в соответствии с действующим законодательством З-3 - Сделать обзор современных цифровых средств и технологий, используемых для обработки, анализа и передачи данных при решении поставленных задач П-1 - Обосновать выбор технических и программных средств защиты персональных данных и данных организации при работе с информационными системами на основе анализа потенциальных и реальных</p>	<p>Домашняя работа Зачет Контрольная работа Практические/семинарские занятия</p>

	<p>угроз безопасности информации</p> <p>П-2 - Решать поставленные задачи, используя эффективные цифровые средства и средства информационной безопасности</p> <p>У-1 - Определять основные угрозы безопасности при использовании информационных технологий и выбирать оптимальные способы и средства защиты персональных данных и данных организации от мошенников и вредоносного ПО</p> <p>У-2 - Выбирать современные цифровые средства и технологии для обработки, анализа и передачи данных с учетом поставленных задач</p>	
<p>ПК-1 -Способен проводить анализ научной и технической информации в области химической технологии и биотехнологии, а также смежных дисциплин с целью научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок</p>	<p>З-1 - Сделать обзор основополагающих концепций биоинформатики, информационных технологий, способов получения, организации и анализа данных</p> <p>З-3 - Понимать основные направления развития химической технологии и биотехнологии и различия концепций и подходов в контексте их развития</p> <p>П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами биоинформатики</p> <p>П-3 - Иметь практический опыт работы с научными и техническими источниками в области химической технологии и биотехнологии</p> <p>П-4 - Иметь практический навык систематизации и анализа данных</p> <p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Зачет</p> <p>Контрольная работа</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

	<p>требует использования методов биоинформатики</p> <p>У-3 - Критически оценивать приведенные в научных и технических источниках данные в области химической технологии, биотехнологии и смежных дисциплин</p> <p>У-4 - Выделять практически значимые направления развития химической технологии и биотехнологии и смежных дисциплин</p> <p>У-5 - Проводить анализ различных технологий и выбирать оптимальный путь решения проблемной задачи</p>	
--	---	--

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лекциям – нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – не предусмотрено		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 1.00		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>домашняя работа</i>	15	30
<i>контрольная работа</i>	14	70
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 0.60		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – 0.40		

3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.

Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

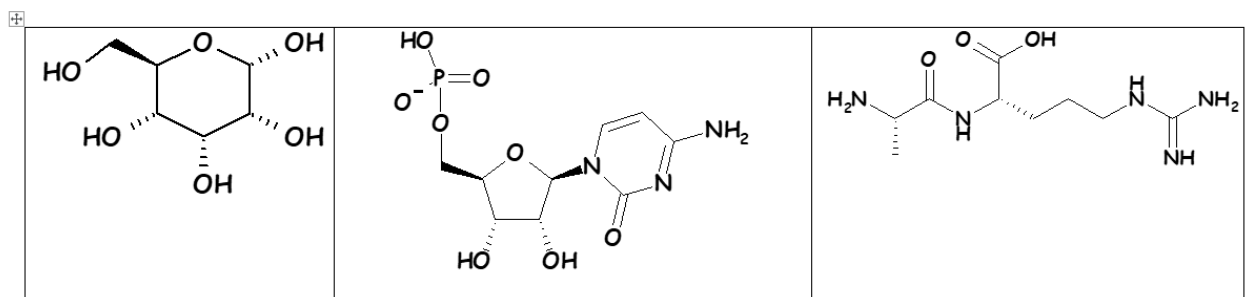
5.1.1. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. История и методы биоинформатики
2. Методы хранения и представления информации в хемо- и биоинформатике
3. Методы анализа ДНК, РНК, первичных белковых последовательностей
4. Методы анализа ДНК, РНК, первичных белковых последовательностей
5. Молекулярное моделирование
6. Молекулярный докинг
7. Молекулярная динамика

Примерные задания

Пронумеровать, используя алгоритм Моргана, и записать в WLN, ROSDAL, SMILES и SLN.



Нарисовать молекулу и пронумеровать по алгоритму Моргана, записать в системе WLN, SMILES и SLN

-ISIS- 10130513072D

```
11 11 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-3.2893 1.1340 0.0000 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.2815 1.9375 0.0000 C 0 0 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.4962 2.2135 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.4962 3.0410 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.9663 2.4051 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.9045 3.2340 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-4.5885 3.7015 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-5.3369 3.3423 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-5.3971 2.5109 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-4.7122 2.0472 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.8231 1.7366 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5 6 2 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0 0
6 7 1 0 0 0 0
2 3 1 0 0 0 0
7 8 2 0 0 0 0
3 4 2 0 0 0 0
8 9 1 0 0 0 0
2 5 1 0 0 0 0
```

```
9 10 2 0 0 0 0
10 5 1 0 0 0 0
3 11 1 0 0 0 0
M END
```

Нарисовать молекулу и пронумеровать по алгоритму Моргана и записать в коде SMILES, SLN и WLN

```
N 0.000000 0 0.000000 0 0.000000 0 0 0 0
C 1.469900 1 0.000000 0 0.000000 0 1 0 0
C 1.519900 1 109.470900 1 0.000000 0 2 1 0
O 1.220000 1 119.999900 1 179.999917 1 3 2 1
C 1.540000 1 109.471000 1 240.000500 1 2 1 3
C 1.519900 1 109.471000 1 180.000003 1 5 2 1
O 1.219900 1 120.000000 1 179.999953 1 6 5 2
N 1.320000 1 119.999900 1 359.999953 1 6 5 2
O 1.499900 1 120.000000 1 359.999917 1 3 2 1
H 0.990000 1 119.999900 1 59.999700 1 1 2 3
H 1.010000 1 109.470993 1 292.239097 1 1 2 3
H 1.090000 1 109.471400 1 180.000000 1 2 1 10
H 1.090000 1 109.471000 1 299.999403 1 5 2 1
H 1.089900 1 109.471400 1 59.999703 1 5 2 1
H 1.010000 1 120.000000 1 180.000000 1 8 6 5
H 1.010000 1 120.000000 1 359.999900 1 8 6 5
H 0.960000 1 109.471000 1 180.000000 1 9 3 2
```

Тестовые задания

Метагеномика занимается изучением:

- а) Генетического материала любых сообществ
- б) Генетического материала только сообществ животных и человека
- в) Бактерий, вирусов и других микроорганизмов, населяющих сообщество
- г) Только бактерий, населяющих сообщество
- д) Функциональных связей между микроорганизмами в сообществе
- у) Только таксономическим анализом микроорганизмов, населяющих сообщества

Выберите верные суждения о геноме :

- а) Геном - совокупность всего генетического материала организма/отдельной клетки
- б) Геном может быть представлен только ДНК
- в) У некоторых вирусов геном представлен РНК
- г) Размер генома не зависит от эволюционного возраста вида
- д) Геном человека впервые был расшифрован в 1953 году
- у) Геном человека самый большой среди живых организмов
- ж) Самый маленький геном принадлежит представителю вирус

Выберете верные суждения о репликации ДНК *

- а) Репликация - процесс синтеза РНК по матрице ДНК
- б) Для репликации необходима ДНК-полимераза, которая способна пришивать нуклеотиды

только к 5'-концу

в) Для репликации необходима ДНК-полимераза, которая способна пришивать нуклеотиды только к 3'-концу

г) Для репликации необходима ДНК-полимераза, которая способна пришивать нуклеотиды и к 3'-концу, и к 5'-концу

в) Репликация происходит всякий раз, когда размножаются клетки организма

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа

Примерный перечень тем

1. Способы компьютерного представления информации о строении биополимеров и малых молекул

2. Методы фолдинга биополимеров

3. Методы сравнения первичных последовательностей биополимеров.

Филогенетический анализ

4. Методы молекулярного моделирования биополимеров в дизайне лекарств

5. Оценка результатов молекулярного моделирования

Примерные задания

Определить строение химического соединения по представленному фрагменту pdb или sdf файла

Восстановить филогенетическое дерево для ряда объектов (не более 5) со случайными дистанциями по методу single-linkage или complete-linkage

Белки. Классификация. Строение. Функции.

Методы секвенирования белков и ДНК.

Регуляция биохимических процессов при различных типах белок-лигандных взаимодействий. Примеры.

Типы оценочных функций в молекулярном докинге. Понятие docking score.

Выравнивание первичных последовательностей. Алгоритм Нидлмана-Вунша.

Расстояние Левенштейна. Провести выравнивание пары коротких последовательностей (до 5 символов в слове).

Дизайн белков. Проблема фолдинга. Парадокс Левинталя. Инструменты и методы решения проблемы фолдинга.

Принципиальная схема проведения молекулярной динамики белка. Выбор ансамблей NPT и NVT.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Домашняя работа

Примерный перечень тем

1. Проведение докинга по гомологичной модели белка патогена

Примерные задания

Выполнение домашней работы подразумевает работу по ключевым темам, изучаемым в рамках курса. За обучающимся остаётся свобода выбора белка патогена для выполнения работы. В случае сложностей в выборе штамма патогена, могут быть предложены белки вируса гриппа штамма A/Puerto Rico/8/1934(H1N1).

Элементы домашнего задания:

1. Выбор первичной последовательностей выбранного обучающимся белка патогена, например: любого вируса гриппа (например: HA, NA, PB2, PA, M2), SARS-CoV-2 (например: s-белок, главная протеаза, РНК-зависимая РНК-полимераза), ВИЧ-1, гонореи, золотистого стафилококка и т.д.

2. Филогенетический анализ – сравнение методом иерархической кластеризации первичной последовательностей выбранного белка патогена с другими вариантами этого же белка патогена других штаммов (~30 белков патогена других штаммов)

3. Гомологичное моделирование выбранного в п.1 белка патогена в веб-сервисе SWISS-MODEL.

4. Поиск сайтов связывания биологически активных веществ в полученной гомологичной модели белка.

5. Проведение молекулярного докинга в proteins.plus нескольких малых молекул (~5 объектов) по одному из найденных сайтов связывания. Структуры для докинга могут быть предложены студентом).

Результаты выполнения работы могут быть представлены в виде изображений, медиафайлов и/или в текстовом формате. Выступления (защиты) студентов проходят на практических занятиях. После выступления (защиты) обсуждаются используемые подходы, возникшие сложности/ошибки.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Белки. ДНК. РНК. Строение. Функции.
2. Синтез белков. Кодоны, антикодоны, стоп-кодона.
3. Методы секвенирования белков и нуклеиновых кислот. Секвенирование по Сенгеру
4. Форматы хранения данных о структуре биополимеров и химических молекул. Форматы sdf, pdb, mol2, xyz. Структура файлов.
5. Базы данных биологической и биотехнологической информации. NCBI, KEGG, Uniprot, RCSB. Виды предоставляемой информации, инструменты для работы.
6. Способы представления биополимеров и химических соединений. FASTA, SMILES.
7. Методы выравнивания первичных последовательностей биополимеров. Алгоритм Нидлмана-Вунша. Понятия «gap, match, mismatch». Расстояние Левенштейна. Разобрать на паре записей (до 5 символов в каждой).
8. Множественное выравнивание первичных последовательностей. Оценка схожести/различия между парой последовательностей. Филогенетический анализ

9. Иерархические методы кластеризации. Методы single- и complete-linkage в филогенетическом анализе. Разобрать на конкретном примере (матрица не более 5x5 со случайно заданными расстояниями между объектами).

10. Методы генерации третичной структуры белков. Парадокс Левинталя. Методы по гомологии и ab initio. Примеры инструментов/инициатив. AlphaFold, FoldIt, Swiss-model. Оценка качества моделей.

11. Методы поиска сайтов связывания биологически активных веществ в белках.

12. Методы молекулярного моделирования белок-лигандных взаимодействий.

13. Мишень-ориентированный поиск лекарственных препаратов. Цели, методы, ограничения.

14. Молекулярный докинг и молекулярная динамика. Сходства и различия методов, примеры инструментов, ограничения подходов.

15. Типы оценочных функций в молекулярном докинге

16. Алгоритмы поиска в молекулярном докинге

17. Молекулярная динамика. Принципы метода, ограничения. Инструменты/сервисы для работы.

18. Ансамбли NPT и NVT в молекулярной динамике. Понятие о баростатах и термостатах. Метод искусственного отжига.

19. Неиерархические методы кластеризации. Метод k-mean (k-средних). Принцип метода, ограничения.

20. Метод выравнивания трехмерных структур белков. Алгоритм FATCAT. Принцип метода в гибком и жестком вариантах работы.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.