

Bioinformatyka strukturalna

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Bioinformatyka		Cykl dydaktyczny 2024/25	
Specjalność -		Kod zajęć 01BINS.22N.00420.24	
Jednostka organizacyjna Wydział Biologii		Języki wykładowe polski	
Poziom studiów studia drugiego stopnia		Obligatoryjność Obowiązkowy	
Forma studiów studia stacjonarne		Blok zajęciowy Przedmioty nieprzypisane	
Profil studiów profil ogólnoakademicki			
Koordynator zajęć	Jan Brezovsky		
Prowadzący zajęcia	Jan Brezovsky		
Okres Semestr 2	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia - Wykład: 10, Egzamin - Laboratorium: 20, Zaliczenie z oceną		Liczba punktów ECTS 3

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przewidywanie struktury kompleksów białko-białko
C2	Ocenianie wpływu mutacji na strukturę i funkcję białka
C3	Przewidywanie struktury białek przy niskiej lub zerowej homologii
C4	Zrozumienie zasad zaawansowanych metod bioinformatyki strukturalnej i symulacji dynamiki molekularnej
C5	Zapoznanie z ograniczeniami i zastosowaniem zaawansowanych metod bioinformatyki strukturalnej oraz symulacji dynamiki molekularnej
C6	Zapoznanie z obsługiwaniem wybranych, ogólnodostępnych programów do zaawansowanych przewidywań i symulacji dynamiki molekularnej

Wymagania wstępne

Wiedza na poziomie kursu: Podstawy bioinformatyki strukturalnej (01-22-STRUKBIN-BIN).

Efekty uczenia się dla zajęć

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
Wiedzy - Student/ka:			
W1	rozumie zasady zaawansowanych metod bioinformatyki strukturalnej oraz symulacji dynamiki molekularnej	BIN_K2_W02, BIN_K2_W05	Test, Projekt
W2	zna ograniczenia i zastosowania zaawansowanych metod bioinformatyki strukturalnej oraz symulacji dynamiki molekularnej	BIN_K2_W02, BIN_K2_W05	Test, Projekt
W3	rozumie konsekwencje zespołowej natury białek	BIN_K2_W03, BIN_K2_W05	Test, Projekt
W4	rozumie mechanizm leżący u podstaw skutków szkodliwych i korzystnych mutacji	BIN_K2_W03, BIN_K2_W05	Test, Projekt
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi zaprojektować i wykonać zaawansowane przewidywania strukturalne i symulacje dynamiki molekularnej nietrywialnych problemów biologicznych	BIN_K2_U03, BIN_K2_U04	Projekt

Treści programowe dla zajęć

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
1.	Kompleksy białkowo-białkowe - metody przewidywania.	W1, W2, U1	Wykład, Laboratorium

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
2.	Mutacje białek - strukturalne podstawy skutków mutacji, zrozumienie skutków poprzez adnotację afektowanych regionów, przewidywanie zmutowanych struktur i efektów.	W1, W2, W4, U1	Wykład, Laboratorium
3.	Przewidywanie struktury białek bez matrycy - wykrywanie fałdowania i metody de novo.	W1, W2, U1	Wykład, Laboratorium
4.	Wprowadzenie do symulacji dynamiki molekularnej - modelowanie oddziaływań i pól sił, warunki brzegowe i rozpuszczalnik, równania ruchu, utrzymywanie temperatury i ciśnienia, właściwości systemu obliczeniowego, analizy symulowanych danych.	W1, W2, W3, U1	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Wykład	Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień
Laboratorium	Rozwiązanie zadań (np.: obliczeniowych, artystycznych, praktycznych), Metoda projektu

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunkiem zdania egzaminu jest pozytywne napisanie testu: 15 pytań wielokrotnego wyboru z częściowym przyznawaniem punktów dodatnich i ujemnych w ramach jednego pytania. Ogólny system oceniania: 13+ punktów = 5,0 11,50-12,99 pkt = 4,5 10,00-11,49 pkt = 4,0 8,50-9,99 pkt = 3,5 7,00-8,49 pkt = 3,0 0,00-6,99 pkt = 2,0 Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest zaliczenie ćwiczeń z zajęć.
Laboratorium	Warunkiem zaliczenia ćwiczeń jest uzyskanie pozytywnej oceny z projektu. Schemat oceniania z projektu indywidualnego: 90,00-100,00 punktów = 5,0 80,00-89,99 punktów = 4,5 70,00-79,99 punktów = 4,0 60,00-69,99 punktów = 3,5 50,00-59,99 punktów = 3,0 0,00-49,99 pkt = 2,0

Literatura

Obowiązkowa

1. Gu J & Bourne PE : Structural Bioinformatics, 2nd Edition, Wiley-Blackwell, Hoboken, New Jersey, 2009
2. Leach AR: Molecular modelling: principles and applications, 2nd Edition, Prentice Hall, Harlow, 2001
3. Jumper J, et al. (2021) Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature 596: 583-589
4. BaekM, et al. (2021) Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. Science 373: 871-876

Dodatkowa

1. Kmiecik S et al (2016): Coarse-grained protein models and their applications, Chemical Reviews, 116: 7898-7936
2. Moreira IS et al (2010): Protein-protein docking dealing with the unknown, Journal of computational chemistry, 31: 317-342
3. Keskin O et al (2016): Predicting Protein-Protein Interactions from the Molecular to the Proteome Level, Chemical Reviews, 116: 4884-4909
4. Lensink MF et al (2016): Prediction of homoprotein and heteroprotein complexes by protein docking and template-based modeling: A CASP-CAPRI experiment, Proteins, 84: 323-348
5. Thusberg J & Vihinen M (2009): Pathogenic or not? And if so, then how? Studying the effects of missense mutations using bioinformatics methods, Human Mutation, 30: 703-714
6. Bradley P et al (2005): Toward high-resolution de novo structure prediction for small proteins, Science, 309: 1868-71
7. Green JG, et al. (2022) A guide to machine learning for biologists. Nat Rev Mol Cell Biol 23: 40-55
8. Kuhlman B, et al.(2019) Advances in protein structure prediction and design. Nat Rev MolCell Biol20, 681-697
9. BianL, et al.(2018) Finding the needle in the haystack: towards solving the protein-folding problem computationally. CritRev BiochemMolBiol53: 1-28

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	10
Laboratorium	20
Przygotowanie do zajęć	10
Czytanie wskazanej literatury	20
Przygotowanie projektu	6
Przygotowanie do egzaminu	10
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 76
Liczba punktów ECTS	ECTS 3

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
BIN_K2_U03	Absolwent/ka potrafi samodzielnie dobierać i stosować zaawansowane metody bioinformatyczne do opisywania złożonych zjawisk i procesów biologicznych oraz analizy wielkoskalowych danych biologicznych
BIN_K2_U04	Absolwent/ka potrafi formułować i rozwiązywać złożone problemy biologiczne z zastosowaniem narzędzi bioinformatycznych
BIN_K2_W02	Absolwent/ka zna i rozumie w pogłębionym stopniu metody, techniki i narzędzia informatyczne stosowane w analizie danych biologicznych
BIN_K2_W03	Absolwent/ka zna i rozumie złożone zjawiska i procesy biologiczne oraz ich wzajemne powiązania na różnych poziomach organizacji życia
BIN_K2_W05	Absolwent/ka zna i rozumie w pogłębionym stopniu zagadnienia związane z określaniem i modelowaniem struktury przestrzennej makrocząsteczek biologicznych z zastosowaniem metod eksperymentalnych i obliczeniowych