

Poniżej znajdują się **treści programowe dla zajęć ograniczonego wyboru:**

**Bioinformatyka i bazy danych** lub **Bioinformatyka z modelowaniem białek.**

Pełne sylabusy zostaną ogłoszone przed rozpoczęciem semestru zimowego 2024/25.

**Bioinformatyka i bazy danych – moduł:**

**wykład: 15 godz., 2 ECTS, zaliczenie na ocenę**

- przedmiot i poziomy analiz bioinformatyki;
- podstawowe terminy związane z bioinformatyką;
- rodzaje baz danych; odstawowe bazy sekwencji nukleotydowych i aminokwasowych: GenBank, EMBL, UniProt. Baza NCBI;
- komputerowe identyfikowanie sekwencji kodujących białko: poszukiwanie otwartych ramek odczytu, poszukiwanie genów u Prokaryota i Eukaryota, metody rozpoznawania genów na podstawie składu, sygnałów, podobieństwa do innych sekwencji;
- zintegrowane metody poszukiwania genów (analiza dyskryminacyjna, programowanie dynamiczne, sieci neuronowe, łańcuchy Markowa);
- komputerowe analizy sekwencji RNA, przewidywanie struktury drugorzędowej;
- przyrównanie (dopasowanie) par sekwencji – alignment: definicja, zastosowanie, rodzaje metod (macierz punktów, programowanie dynamiczne – przyrównanie lokalne i globalne), systemy punktacji (macierze aminokwasowe PAM i BLOSUM, kary dla przerw), ocena istotności przyrównania, przykłady programów;
- przyrównanie wielu sekwencji (definicja, zastosowanie, etapy postępowania i kryteria wyboru sekwencji, rodzaje algorytmów i programów, progresywne przyrównanie globalne. Poszukiwanie sekwencji podobnych w bazach danych (podstawowa terminologia i cele, sposoby poszukiwań, rodzaje programów i algorytmów (FASTA, BLAST), kryteria i istotność podobieństwa sekwencji, rodzaje programów z rodziny BLAST i ich opcje, np. MegaBLAST, PSI-BLAST, PHI-BLAST);
- komputerowa analiza sekwencji białkowych: analiza podstawowych właściwości fizykochemicznych białka, poszukiwanie regionów transbłonowych, modyfikacje potranslacyjne białek, określanie lokalizacji subkomórkowej białek, poszukiwanie motywów i domen, określanie struktury drugorzędowej białka;
- bazy struktur przestrzennych (PDB), przyrównanie strukturalne, metody przewidywania struktur przestrzennych, klasyfikacja strukturalna białek, programy do oglądania struktur przestrzennych;
- filogenetyka molekularna: filogenetyka molekularna a klasyczna, etapy analiz filogenetycznych (zebranie sekwencji homologicznych, przyrównanie sekwencji, określenie modelu substytucji, skonstruowanie drzewa filogenetycznego, analiza i ocena drzewa filogenetycznego).

**ćw. komputerowe: 30 godz., 2 ECTS, zaliczenie na ocenę**

- wyszukiwanie informacji zawartych w bazach literaturowych, bazach sekwencji nukleotydowych i aminokwasowych;
- podstawowe analizy bioinformatyczne sekwencji nukleotydowych: analiza składu, określanie używalności kodonów;
- poszukiwanie sekwencji kodujących białko w genomach prokariotycznych i eukariotycznych;
- analiza komputerowa sekwencji RNA;
- komputerowa analiza sekwencji białkowych: analiza podstawowych właściwości fizykochemicznych białka, komputerowe trawienie białka, poszukiwanie regionów transbłonowych, modyfikacje potranslacyjne białek, określanie lokalizacji subkomórkowej białek, poszukiwanie motywów i domen w białku, określanie struktury drugorzędowej i trzeciorzędowej białka;

- baza PDB;
- przyrównywanie par sekwencji: macierz punktów, przyrównanie globalne i lokalne;
- przyrównywanie wielu sekwencji, edytowanie przyrównania;
- poszukiwanie sekwencji podobnych w bazach danych przy użyciu algorytmu BLAST;
- zbieranie zbioru sekwencji w celu utworzenia drzew filogenetycznych;
- określanie modelu substytucji; konstruowanie drzew filogenetycznych; szacowanie istotności gałęzi drzewa.

### **Bioinformatyka z modelowaniem białek – moduł:**

#### **wykład: 15 godz., 2 ECTS, zaliczenie na ocenę**

- gromadzenie, analiza oraz przetwarzanie informacji;
- budowa i rodzaje baz danych, wykorzystanie informacji pochodzących z baz danych;
- porównywanie sekwencji białkowych i nukleotydowych, typy homologii oraz podobieństwa, matryce podobieństwa;
- tok postępowania przy analizie sekwencji;
- algorytmy oraz programy do analiz i uwspólniania sekwencji (alignment);
- podstawy dynamiki molekularnej, sieci neuronowych oraz algorytmów genetycznych;
- przewidywanie struktur drugo- oraz trzeciorzędowych białek; modelowanie homologiczne;
- zastosowanie metod statystycznych oraz dynamiki molekularnej;
- integracja metod przewidywania struktury i funkcji białek;
- przewidywanie oddziaływań pomiędzy białkami oraz białkami i ligandami niskocząsteczkowymi; metody projektowania białek o pożądanym własnościach oraz niskocząsteczkowych ligandów oddziałujących z makrocząsteczkami.

#### **ćw. komputerowe: 30 godz., 2 ECTS, zaliczenie na ocenę**

- zapoznanie z bazami danych (PubMed, UniProt, PDB) oraz z narzędziami i algorytmami do porównywania sekwencji (BLAST, ClustalW);
- tok postępowania przy analizie sekwencji i jej uwspólnianiu (alignment);
- obrazowanie trójwymiarowych struktur białkowych (m.in. w programie Swiss Viewer);
- przewidywanie miejsc modyfikacji potranslacyjnych, modelowanie struktury białka, detekcja reszt aminokwasowych oddziałujących w kompleksie białko-białko, białko-ligand;
- podstawowe zagadnienia dotyczące manipulacji sekwencjami DNA - klonowanie, analiza sekwencji nukleotydowej i aminokwasowej transkryptu za pomocą dostępnych programów i algorytmów.