|  |
| --- |
|  |

**MODULIO APRAŠAS**

|  |  |
| --- | --- |
| **Modulio pavadinimas** | **Kodas** |
| **Bioinformatika III** |  |

|  |  |
| --- | --- |
| **Dėstytojas** | **Padalinys** |
| **Koordinuojantis**: **Saulius Gražulis**  **Kitas (-i):** | Matematinės informatikos katedra  Matematikos ir informatikos fakultetas  Vilniaus universitetas |

|  |  |
| --- | --- |
| **Studijų pakopa** | **Dalyko tipas** |
| Pirmoji | Privalomasis |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Įgyvendinimo forma** | **Vykdymo laikotarpis** | **Vykdymo kalbos** |
| Auditorinė | 6 semestras | Lietuvių |

|  |
| --- |
| **Reikalavimai studijuojančiajam** |
| **Išankstiniai reikalavimai: programavimo metodikos pagrindai, tiesinė algebra, matematinė analizė** |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Modulio apimtis kreditais** | **Visas studento darbo krūvis** | **Kontaktinio darbo valandos** | **Savarankiško darbo valandos** |
| 5 | 136 | 66 | 72 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Modulio tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos** | | |
| Modulio tikslas – išmokyti studentus surasti reikiamą struktūrinę informaciją atvirose duomenų bazėse, apdoroti ją  egzistuojančiomis programomis bei savo pačių realizuotais algoritmais, kritiškai išanalizuoti skaičiavimo rezultatus ir gauti iš jų moksliškai pagrįstas biologijos mokslams svarbias išvadas.  ***Bendrosios kompetencijos:***   * Gebėjimas ieškoti duomenų informacijos šaltiniuose, analizuoti, vaizduoti ir sisteminti gautus duomenis. (*BK1*). * Gebėjimas žinias pritaikyti praktikoje (*BK2*).   ***Dalykinės kompetencijos:***   * Gamtos ir gyvybės mokslų (*DK7*). * Program sistemų inžinerijos (*DK8*). * Duomenų kodavimo, vaizdavimo ir tyrimo (*DK9*). * Bioinformatikos duomenų gavybos, vaizdavimo ir analizės (*DK11*). | | |
| **Modulio studijų siekiniai** | **Studijų metodai** | **Vertinimo metodai** |
| Supažindinti su biomolekulių  struktūromis, jų santykiu su  molekuline/biologine funkcija, taip pat su  struktūrų gavimo, analizės ir nusakymo  metodais. | Paskaitos, praktikos darbai, individualių  programavimo užduočių įgyvendinimas |  |
| Suprasti struktūrinių duomenų  panaudojimo galimybes, mokėti įvertinti  jų patikimumą, naudotis egzistuojančiais  struktūrų analizės metodais. |
| Savarankiškai kurti programas ir  algoritmus struktūrinei informacijai  apdoroti. |
| Mokėti kritiškai įvertinti jau egzistuojančių ir savų programų skaičiavimo rezultatus. |
| Sugebėti iš struktūrinių skaičiavimų  rezultatų padaryti moksliškai pagrįstas  išvadas, svarbias gyvybės mokslams. |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Temos** | **Savarankiškų studijų laikas ir užduotys** | | | | | | **Savarankiškų studijų laikas ir užduotys** | |
| Paskaitos | Konsultacijos | Seminarai | Pratybos | Laboratoriniai darbai (LD) | **Visas kontaktinis darbas** | **Savarankiškas darbas** | **Užduotys** |
| 1. Baltymų ir nukleorūgščių struktūrinė  organizacija, jos lygmenys (pirminė, antrinė,  tretinė, ketvirtinė struktūros) | 2 |  |  | 2 |  | **4** | **4** | Savarankiškas  papildomų šaltinių  studijavimas;  Individualios  programavimo  užduotys, pateiktos  http://sauliusgrazulis.  lt/~saulius/pa  skaitos/VU/bioinform  atika-III/užduotyspraktikai/  tinklalapyje. |
| 2. Struktūrų aprašymas kompiuteriuose:  koordinačių sistemos, failų formatai (PDB, CIF, etc.) | 6 |  |  | 6 |  | **12** | **11** |
| 3. Baltymo grandinės geometrija | 2 |  |  | 2 |  | **4** | **4** |
| 4. Baltymų ir nukleorūgščių struktūrą  apsprendžiančios sąveikos ir informacijos apie jas panaudojimas struktūrų tikrinimui bei spėjimui | 6 |  |  | 6 |  | **12** | **11** |
| 5. Kristalų simetrija ir jos panaudojimas  makromolekulių struktūrų aprašymuose. | 4 |  |  | 4 |  | **8** | **8** |
| 6. Eksperimentiniai metodai ir juo teikiama  informacija apie struktūras | 4 |  |  | 4 |  | **8** | **8** |
| 7. Algoritmai struktūrų geometrijos analizei  (Kabšo ir kt.) | 6 |  |  | 6 |  | **12** | **13** |
| 8. Trimačių struktūrų spėjimas ir verifikavimas | 2 |  |  | 2 |  | **4** | **3** |
| 9. Pasiruošimas egzaminui, egzaminas |  | 2 |  |  |  | **2** | **10** |
| **Iš viso** | **32** | **2** |  | **32** |  | **66** | **72** |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Vertinimo strategija** | **Svoris proc.** | **Atsiskaitymo laikas** | **Vertinimo kriterijai** |
| Darbas paskaitose (paskaitų  apklausos) | 10 | 10 min. prieš  kiekvieną  praktikos darbą | Testas iš 4 klausimų, apimančių jau išklausytų paskaitų  medžiagą. Sumuojamas balų už teisingai atsakytus klausimus skaičius; maksimali visų tokių apklausų balų suma – 100 balų.  Paprastai organizuojamas virtualioje mokymosi aplinkoje, bet gali būti panaudotas testas raštu. |
| Tarpinis kontrolinis | 15 | semestro  vidurys (po  maždaug pusės  paskaitų) | Testas (virtuali mokymosi aplinka) iš 50 klausimų,  apimančių 1-4 temas. Maksimali balų už atsakymus suma – iki 150 balų. |
| Praktikos darbų  atsiskaitymai | 50 | Po kiekvieno  praktikos darbo  pagal nustatytą  grafiką. | Studentai įkelia į virtualią mokymosi aplinką savo praktinio darbo rezultatus. Vertinimo kriterijai: pasiektas praktikos darbo tikslas – iki 30%; programavimo stilius ir programos teksto tvarkingumas – iki 30%; bendros dalyko žinios – iki 40% kiekvieno darbo įvertinimo (vertinimo lentelės pateikiamos prie kiekvienos užduoties). |
| Praktikos darbo ataskaitos  pristatymas | 10 | Paskutinė  semestro  savaitė | Studentai įkelia į virtualią mokymosi aplinką savo praktinio darbo ataskaitą ir perskaito 5—10 min. pranešimą grupėje.  Darbo ataskaitą būtina pateikti pagal VU darbų apipavidalinimo taisykles. Vertinimo kriterijai: pasiektas  praktikos darbo tikslas – iki 30 balų; bendros dalyko žinios ir temos supratimas (atsakymai į 3 klausimus žodžiu iš darbo temos) – iki 30 balų; darbo apipavidalinimas – iki 20 balų; pranešimo dėstymas – iki 20 balų; viso – iki 100 balų. |
| Viso | 100 |  | Galutinis pažymys yra suminis paskaitų apklausų, tarpinio  kontrolinio, praktikos darbų rezultatų, praktikos darbo  ataskaitos ir egzamino balas (iki 1000 balų), padalintas iš 100, apvalinamas iki artimiausio didesnio sveiko skaičiaus (pvz., 901 balas apvalinamas iki galutinio įvertinimo 10). |

|  |  |
| --- | --- |
| **Reikalavimai dalyko vertinimui eksterno būdu** | |
| Įvertinimas galimas eksterno būdu: | nenumatytas |
|  | |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Autorius** | **Leidimo metai** | **Pavadinimas** | **Periodinio leidinio Nr.**  **ar leidinio tomas** | **Leidimo vieta ir leidykla**  **ar internetinė nuoroda** |
| **Privalomoji literatūra** | | | | |
| Anna Tramontano | 2006 | Protein Structure Prediction |  | Wiley-VCH |
| Janusz Bujnicki (Editor) | 2004 | Practical Bioinformatics |  | Springer |
| Carl Branden, John Tooze | 1991 | Introduction to Protein  Structure |  |  |
| А. В. Финкельштейн, О.  Б. Птицын | 2005 | Физика Белка |  | Москва, КДУ |
| **Papildoma literatūra** | | | | |
| Arthur M. Lesk | 2002 | Introduction to Bioinformatics |  | Oxford University Press |
| Dong, Q. & Wu, Z. | 2002 | A linear-time algorithm for  solving the molecular distance  geometry problem with exact  inter-atomic distances. *Journal*  *of Global Optimization* |  | Springer |
| Kabsch, W. | 1976 | A solution for best rotation to  relate two sets of vectors. *Acta*  *Crystallographica A* | vol. 32,  pp. 922-923 | IUCr/Wiley |
|  | 1968-  2058 | *Originalūs straipsniai apie*  *bioinformatinius algoritmus iš*  *Acta Crystallographica,*  *Bioinformatics ir kitų žurnalų* |  | IUCr, Wiley, OUP, Academic  Press, Springer, etc. |