

Анотація навчальної дисципліни

«Біоінформатика у біохімічних дослідженнях»

Анотація. «Біоінформатика у біохімічних дослідженнях» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта, що пропонуються в рамках циклу дисциплін професійної підготовки аспірантів зі спеціальності «Біологія та біохімія» на другому році навчання. Вона забезпечує професійний розвиток аспіранта та спрямована на отримання фахових теоретичних та практичних знань для пошуку та конструювання нових біоактивних сполук та матеріалів та опанування сучасними *in silico* методами дослідження фізико-хімічних та біологічних властивостей хімічних речовин, що є запорукою подальшої успішної самостійної дослідницької роботи майбутнього вченого. Особлива увага в курсі буде приділятися використанню програмного забезпечення для створення та оперування базами даних та побудові прогнозуючих моделей біологічної активності, токсичності та інших властивостей.

Кількість кредитів: 4

Викладач: Година Діана Миколаївна, канд. біол. наук, старш. наук. співр. відділу медико-біологічних досліджень Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України.

Мова викладання: українська.

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА 2.04 читається на другому році навчання.

Термін вивчення: дисципліна вивчається на другому році навчання за освітньо-науковим рівнем «доктор філософії» в обсязі 120 годин, у тому числі 40 години аудиторних занять (22 год. – лекційні заняття, 18 год. – семінари), 80 год. самостійної роботи.

Мета навчальної дисципліни – ознайомити із предметом, методами, підходами та галузями застосування біоінформатики для науково-практичних цілей, оперуванням базами даних та сучасними методами машинного навчання в біологічних дослідженнях, забезпечити отримання практичних навичок застосування *in silico* методів для пошуку, систематизації та аналізу біологічної інформації, передбачення фізико-хімічних та біологічних властивостей сполук різної природи, сформуванню знання та вміння щодо розробки QSAR-моделей та дизайну матеріалів із заданими властивостями.

Важливою загальною рисою курсу є підготовка аспірантів як ефективних дослідників і викладачів вищої школи, здатних самостійно

аналізувати спеціальну літературу та генерувати нові ідеї у рамках раціонального використання підходів моделювання, зокрема методів машинного навчання, для розробки потенційних біоактивних сполук.

Змістовні модулі дисципліни:

- Біоінформатика. Біоінформаційні бази даних. Комп'ютерне моделювання біологічно активних речовин.
- Прогнозування біологічних властивостей хімічних сполук.

У результаті вивчення курсу аспірант повинен:

Знати: основні принципи біоінформатики, прийоми та принципи пошуку спеціалізованої (біологічної та хімічної) інформації у глобальній мережі, основні концепції аналізу біологічних даних, основи організації біологічної інформації на молекулярному рівні, принципи пошуку і конструювання потенційно біоактивних сполук, методи побудови комп'ютерних моделей прогнозування біологічної активності та токсичності, особливості визначення біологічної активності хімічної сполуки відповідно до її структури.

Вміти: систематизувати та аналізувати біологічні дані, працювати з електронними базами даних в галузі хімії і біології, обирати та застосовувати найбільш придатні методи математичного моделювання та оптимізації при проведенні наукового дослідження, користуватися доступними програмами пошуку та дизайну біологічно активних хімічних сполук, створювати комп'ютерні прогнозуючі моделі біологічної активності/токсичності сполук різної природи, проводити віртуальний скринінг сполук та робити висновки щодо їх хімічної модифікації, цілісно і системно мислити.