



УТВЕРЖДАЮ»

Декан биологического факультета МГУ

М.П.Кирпичников

2018 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля): **СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ И БИОИНФОРМАТИКИ**

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. Направление подготовки – **06.06.01 Биологические науки**. Направленность (профиль) программы – **Математическая биология и биоинформатика**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП (второй год обучения, 3 и 4 семестры), обязательна для освоения аспирантами, обучающимися по направленности «**Математическая биология и биоинформатика**»

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотносенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<i>УК-1: Способность к кратическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</i>	<i>Видеть:</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В1 (УК-1)

	<p>Владеть:</p> <p>навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p> <p>Код B2 (УК-1)</p>
<p>УК-2</p> <p>Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки.</p>	<p>Знать:</p> <p>методы научно-исследовательской деятельности</p> <p>Код З1 (УК-2)</p>
<p>УК-3:</p> <p>Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач</p>	<p>Владеть:</p> <p>технологиями оценки результатов коллективной деятельности по решению научных и научно-образовательных задач, в том числе ведущейся на иностранном языке</p> <p>Код B2 (УК-3)</p>
<p>УК-4:</p> <p>Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке</p>	<p>Владеть:</p> <p>навыками анализа научных текстов на государственном и иностранном языках</p> <p>Код B1 (УК-4)</p> <p>Знать:</p> <p>стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме на государственном и иностранном языках</p> <p>Код З2 (УК-4)</p>
<p>ОПК-1</p> <p>Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>Уметь:</p> <p>собирать, отбирать и использовать необходимые данные и эффективно применять количественные методы их анализа</p>
<p>ОПК-2</p> <p>Готовность к преподавательской деятельности по</p>	<p>Уметь:</p> <p>доносить до обучающихся в доступной и ясной форме</p>

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единиц, всего 180 академических часов, из которых 104 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (104 часа занятий лекционного типа) и 76 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:

ЗНАТЬ: общую физику, матанализ, биофизику, молекулярную биологию, биохимию, теоретические и методологические основы биологических научных исследований

УМЕТЬ: выработать на основе рационального анализа экспериментальных результатов свою точку зрения в вопросах математической биологии, биоинформатики, биоинженерии и отстаивать ее во время дискуссии со специалистами и неспециалистами; читать и реферировать научную литературу в области биоинженерии, в том числе на иностранных языках, при условии соблюдения научной этики и авторских прав.

ВЛАДЕТЬ: современными информационно-коммуникационными технологиями, иностранным языком.

8. Образовательные технологии: классические лекционные технологии.

9. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				Самостоятельная работа обучающегося, часы из них				
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Введение.	2	2					2			
Пространственная и динамическая организация биомакромолекул.	30	20					20	10		10
Молекулярная биология и генетика	16	10					10	6		6
Термодинамика биологических процессов.	16	10					10	6		6
Кинетика биологических процессов.	16	10					10	6		6

Динамика биологических процессов.	40	20							20	10	10	20
Анализ последовательностей, базы данных и статистические методы.	30	20							20	4	6	10
Геномика, транскриптомика, протеомика, системная биология.	30	12							12	6	12	18
Промежуточная аттестация - экзамен кандидатского минимума												
Итого	180	104							104	48	28	76

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.

Конспекты лекций, аудио- и видеозаписи лекций, файлы презентаций лекций, основная и дополнительная учебная литература (см. п. 11)

11. Ресурсы обеспечения:

Основная литература

1. Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М., Мир, 1982
2. Албертс Б., Брей Д., Льюис Дж., Рафф М., Робертс К., Уотсон Дж. Молекулярная биология клетки. В 3 т. М.: Мир, 1994 г.
3. Хакен Г. Синергетика. М., Мир, 1980
4. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. М., Наука, 1984
5. Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. М., Мир, 1983.
6. Хельгте Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010
7. Лукашов В.В. Молекулярная эволюция и филогенетический анализ. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2009. ISBN 978-5-9963-0176-8.
8. Азнакаев Э.Г. Биоинформатика и геномика. М.: УРСС. 2009.

9. Бороловский М., Екишева С. Задачи и решения по анализу биологических последовательностей. М.: УРСС. 2008.
10. Леск Артур. Введение в биоинформатику. М.: Бинوم. Лаборатория знаний. 2009. ISBN 978-5-94774-501-6.
11. Mount D. W. Bioinformatics. Sequence and genome analysis. Carlos Setubal, Joao Meidanis. Introduction to Computational Molecular Biology.
12. Математические методы для анализа последовательностей ДНК (под ред. М.С. Уотермена). М., Мир, 1999
13. Рубин А.В. Биофизика. т.1. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2013. - 472с.
14. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2012. - 632с

Дополнительная литература

1. Багабаев Н.К., Шайтан К.В. Алгоритмы и методы молекулярной динамики: учебно-методический комплекс для бакалавров. *НОУДПО «Институт АйТи» Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-004-0, 134 с.
2. Ефремов Р.Г., Шайтан К.В. Молекулярное моделирование нано- и биоструктур. Учебно-методический комплекс для магистров *НОУДПО «Институт АйТи Москва*, 2011. ISBN 978-5-98453-039-2, 129 с.
3. Финкельштейн А.В. и Птицын О.Б. Физика белка. Москва 2002.
4. Шустер Х. Детерминированный хаос. М., Мир, 1990
5. Жаботинский А.М. Концентрационные автоколебания. М., Наука, 1974

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

1. Сайт получения доступа к программе молекулярной динамики GROMOS <http://www.igc.ethz.ch/gromos/howtoget.html>
2. Сайт получения доступа к программе молекулярной динамики NAMD <http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi>
3. Сайт получения доступа к программе визуализации структур UMD http://www.ks.uiuc.edu/Research/umd/allversions/what_is_umd.html
4. NCBI BLAST - <http://ftp.ncbi.nih.gov/blast> - Программа для быстрого поиска последовательностей белков или нуклеиновых кислот в банках данных.
5. UniProt Knowledgebase – база данных последовательностей белков и их описание.
6. Сайт группы молекулярного моделирования Биологического факультета МГУ - <http://www.molsim.org>

Интернет-браузер, базы данных UniProt Knowledgebase (<http://www.uniprot.org/help/uniprotkb>), PubMed (NCBI, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>), Protein Data Bank (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>), программа для быстрого поиска последовательностей белков или нуклеиновых кислот NCBI BLAST (<http://ftp.ncbi.nih.gov/blast>)

Описание материально-технической базы.

Биологический факультет МГУ располагает необходимым аудиторным фондом, компьютерами, проекторами и экранами, аудиопаратурой.

12. Язык преподавания: русский

13. Преподаватели:

дфмн, профессор К.В. Шайтан

кфмн, доцент В.Н. Новоселцкий

кфмн, внс А.К. Шайтан



Приложение

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) Математическая биология и биоинформатика на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю), баллы БРС					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
	1	2	3	4	5	
<p>Владеть:</p> <p>навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В1 (УК-1)</p>						- индивидуальное собеседование, экзамен кандидатского минимума
<p>Владеть:</p> <p>навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В2 (УК-1)</p>	0	1-29	30-59	60-89	90-100	- индивидуальное собеседование, экзамен кандидатского минимума
<p>Знать:</p> <p>методы научно-исследовательской деятельности Код З1 (УК-2)</p>	0	1-29	30-59	60-89	90-100	- индивидуальное собеседование, экзамен кандидатского минимума
<p>Владеть:</p>	0	1-29	30-59	60-89	90-100	- индивидуальное собеседование, экзамен

технологиями оценки результатов коллективной деятельности по решению научных и научно-образовательных задач, в том числе ведущейся на иностранном языке Код В2(УК-3)							<i>кандидатского минимума</i>
Знать: стилистические особенности представления результатов научной деятельности в устной и письменной форме на государственном и иностранном языках Код З2(УК-4)	0	1-29	30-59	60-89	90-100		- индивидуальное собеседование, экзамен <i>кандидатского минимума</i>
Владеть: навыками анализа научных текстов на государственном и иностранном языках Код В1(УК-4)	0	1-29	30-59	60-89	90-100		- индивидуальное собеседование, экзамен <i>кандидатского минимума</i>
Уметь: собирать, отбирать и использовать необходимые данные и эффективно применять количественные методы их анализа	0	1-29	30-59	60-89	90-100		- индивидуальное собеседование, экзамен <i>кандидатского минимума</i>

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры вопросов к промежуточному контролю (индивидуальное собеседование):

1. Типы взаимодействий при формировании структуры биомакромолекул.
2. Структуры белков.
3. Структуры нуклеиновых кислот.
4. Самоорганизация пространственной структуры.
5. Структура хроматина.
6. Процессы передачи информации в клетке.
7. Генетические сети.
8. Метаболические сети.
9. Термодинамика слабо неравновесных процессов. Вариационные принципы.
10. Кинетические модели биологических процессов. Линейные и нелинейные модели.
11. Методы молекулярного моделирования.
12. Динамика функциональных процессов.
13. Анализ белковых последовательностей
14. Моделирование структуры по гомологии.
15. Анализ ДНК-последовательностей.
16. Эволюция с точки зрения биоинформатики.
17. Эпигенетика.

ПРОГРАММА

кандидатского минимума по специальности «математическая биология и биоинформатика» 03.01.09

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ. Предмет математической биологии и биоинформатики, их место в естествознании. Взаимосвязь физических, физико-химических, биологических и информационных процессов в живых организмах. Математические методы и модели, используемые для описания указанных взаимосвязей.

Нуклеиновые кислоты. Биологическая роль. Роль ДНК в биосинтезе белка. Понятие о триплетном коде. Химическое строение и пространственная структура нуклеиновых кислот (ДНК, РНК). Модель Уотсона-Крика. Разнообразие формы структур ДНК и РНК. Вода и нуклеиновые кислоты. Взаимодействие с белками. Базы данных по нуклеиновым кислотам.

Пептиды. Биологическая роль. Пептидная связь, ее электронное строение и конфигурация. Строение и свойства аминокислотных остатков. неполярные и полярные боковые группы. Заряженные боковые группы. Вторичная структура полипептидов. Методы экспериментального обнаружения вторичной структуры.

Белки. Биологическая роль. Физико-химические свойства и системы классификации. Особенности состава и пространственной структуры. Иерархия уровней пространственной организации белков. Регулярные структуры полипептидной цепи: α -спираль, β -тяжки, β -изгибы. Пространственная и четвертичная структура белков. Принципы структурной организации глобулярных и фибриллярных белков. Структура и функция ферментов. Белки, образующие матрикс – эластин, коллаген. Мембранные белки, особенности их строения и функции. Базы данных по белкам.

Физические взаимодействия, определяющие пространственную структуру биомолекул. Понятие эмпирического силового поля. Валентные и невалентные взаимодействия в биополимерах. Конформации и конформационная подвижность биомакромолекул. Роль эффектов среды в структурной организации биополимеров. Состояние воды и гидрофобные взаимодействия в биомолекулярных системах. Шкалы гидрофобности. Учет влияния растворителя в расчетах энергии биомолекулярных систем.

Самоорганизация пространственной структуры биополимеров. Парадокс Левинтала. Переход клубок-глобула. Расплавленная глобула. Отличие белковой цепи от случайного сополимера. Проблема сворачивания (фолдинга) биополимеров.

Квантовая химия и электронные свойства биополимеров. Волновая функция системы из электронов и ядер, ее основные свойства. Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение Хартри-Фока. Приближение молекулярных орбиталей. Основные типы молекулярных орбиталей и электронных состояний. Методы расчета электронно-конформационных свойств молекулярных систем. Полуэмпирические и *ab initio* методы квантовой химии.

Электронно-колебательные переходы. Люминесценция биологически важных молекул. Механизмы миграции энергии: резонансный механизм, синглет-синглетный и триплет-триплетный переносы, миграция экситона. Применения методов, основанных на переносе энергии флуоресценции в исследованиях биомакромолекулярных систем.

Возбужденные состояния и трансформация энергии в биоструктурах. Перенос электрона в биоструктурах.

Современные представления о физических механизмах и математических методах описания функционирования биополимеров. Понятие молекулярного докинга. Конформационная динамика и электронно-конформационные взаимодействия в биополимерах. Динамические

механизмы диффузии лигандов и химических реакций с участием биополимеров. Вычислительные методы оценки свободной энергии межмолекулярных взаимодействий.

Метод Монте-Карло в моделировании биомолекулярных систем. Принципы метода, критерий Метрополиса. Типичные алгоритмы реализации метода Монте-Карло (моделирование равновесных состояний, конформационный поиск, взаимодействия белок-лиганд). Сравнительные характеристики методов Монте-Карло и молекулярной динамики. Примеры использования методов Монте-Карло в расчетах биомолекул.

Основные процессы передачи информации в клетке. Репликация, транскрипция, сплайсинг, трансляция. Различие и сходство основных процессов в эукариотах и в прокариотах. Посттрансляционные модификации РНК и белков. Характерные времена основных процессов. Структура ДНК в прокариотах и в эукариотах. Хроматин, основные уровни организации, гистоны, модификация хроматина. Роль хроматина в регуляции экспрессии генов.

Регуляция экспрессии генов. Основные уровни регуляции экспрессии. Регуляция транскрипции, транскрипционные факторы. Модель Жакоба-Моно. Репрессия. Аггеноация. Регуляция литического и лизогенного пути фага лямбда. Сходство и различие регуляции транскрипции в прокариотах и в эукариотах. Понятие о регуляторных модулях.

Регуляция трансляции. Регуляция инициации трансляции в прокариотах и в эукариотах. МикроРНК и механизм регуляции с помощью микроРНК. Стабильность РНК. РНК-интерференция.

Стабильность генома. Репарация. Транспозоны, вирусы, ретротранспозоны.

Наблюдение признаков и изменчивость. Полиморфизмы. Вредные, слабо-вредные и полезные мутации. Признаки стабилизирующего и движущего отбора. Видообразование. Медицинская генетика. Моногенные и полигенные заболевания, анализ семей, ассоциации и молекулярные причины заболеваний.

Понятие об основных экспериментальных методах молекулярной биологии. ПШР, секвенирование, второе поколение секвенирования, микрочипы, белок-белковые взаимодействия, иммунопреципитация хроматина, ChIP-chip, ChIP-seq, масс-спектрометрия. Точность данных массовых экспериментов.

Основные особенности термодинамики биологических процессов.

Классификация термодинамических систем. Особенности применения законов термодинамики в биологии.

Изменение энтропии в открытых системах. Термодинамические условия осуществления стационарного состояния. Связь между величинами химического сродства и скоростями реакций. Термодинамическое сопряжение реакций и тепловые эффекты в биологических системах.

Понятие обобщенных сил и потоков. Линейные соотношения и соотношения взаимности Онзагера. Термодинамика транспортных процессов. Стационарное состояние и условия минимума скорости прироста энтропии. Теорема Пригожина.

Применение линейной термодинамики в биологии. Термодинамические характеристики молекулярно-энергетических процессов в биосистемах. Нелинейная термодинамика.

Общие критерии устойчивости стационарных состояний и перехода к ним вблизи и вдали от равновесия.

Связь энтропии и информации в биологических системах.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ. Закон действующих масс в применении к биологическим системам. Описание динамики биологических процессов на языке химической кинетики. Задачи математического моделирования в биологии. Общие принципы построения математических моделей биологических систем. Динамические модели биологических процессов. Линейные и нелинейные процессы. Методы качественной теории дифференциальных уравнений в анализе динамических свойств биологических процессов. Понятие о фазовой плоскости и фазовом портрете системы. Временная иерархия и принцип "узкого места" в биологических системах. Управляющие параметры. Быстрые и медленные переменные.

Стационарные состояния биологических систем. Многозначность стационарных состояний. Устойчивость стационарных состояний. Модели триггерного типа. Силовое и параметрическое переключение триггера. Гистерезисные явления. Автоколебательные режимы. Предельные циклы и их устойчивость.

Представления о пространственно неоднородных стационарных состояниях (диссипативных структурах) и условиях их образования. Кинетика ферментативных процессов. Особенности механизмов ферментативных реакций. Понятие о физике ферментативного катализа. Кинетика простейших ферментативных реакций. Условия реализации стационарности. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Влияние модификаторов на кинетику ферментативных реакций. Применение метода графов для исследования стационарной кинетики ферментативных реакций. Общие принципы анализа более сложных ферментативных реакций.

Влияние температуры на скорость реакций в биологических системах. Взаимосвязь кинетических и термодинамических параметров. Роль конформационных свойств биополимеров.

Пассивный и активный транспорт веществ через биомембраны. Проницаемость мембран для воды. Связь проницаемости мембран с растворимостью проникающих веществ в липидах. Ионное равновесие на границе мембрана-раствор. Профили потенциала и концентрации ионов в двойном электрическом слое. Пассивный транспорт; движущие силы переноса ионов. Моделирование распространения нервного импульса.

Структурные и энергетические факторы, определяющие динамическую подвижность белков. Качественные представления о строении гиперповерхности конформационной энергии.

Стохастические методы в изучении динамики биоструктур. Уравнения Ланжевена. Теплового шум. Уравнения Смолуховского и Фоккера-Планка. Стохастическая динамика при наличии химических реакций.

Динамическая структура олигопептидов и глобулярных белков; конформационная подвижность. Методы изучения конформационной подвижности: изотопный обмен, люминесцентные методы, ЭПР, рентгено-динамический анализ и гамма-резонансная спектроскопия, ЯМР высокого разрешения, импульсные методы ЯМР, методы молекулярной динамики.

Результаты исследования конформационной подвижности. Ограниченная диффузия. Типы движения в белках. Иерархия амплитуд и времен релаксации конформационных движений. Роль конформационной подвижности в функционировании ферментов и транспортных белков. Молекулярная динамика био- и наноструктур. Алгоритмы и протоколы молекулярной динамики. Типы силовых полей. Моделирование динамики при постоянной энергии и постоянной температуре. Типы термостатов и баростатов. Равновесная и направленная (управляемая) молекулярная динамика. Стохастическая (броуновская) динамика. Ланжевеновская динамика. Рекордные результаты моделирования динамики биоструктур.

Артефакты при моделировании динамики сложных систем. Нефизические аттракторные режимы при использовании термостатов с нелинейным трением.

Гибридные методы квантовой химии и молекулярной динамики. Квантовая молекулярная динамика.

БИОИНФОРМАТИКА И СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ. Основы теоретической информатики. Основные структуры данных, алгоритмы на графах, алгоритмы для строк. Понятие об NP-полных задачах. Стохастические алгоритмы. Реляционные базы данных. Уровни представления данных. Языки описания и манипулирования данными. Системы управления базами данных (СУБД). Архитектура СУБД. Основные конструкции структур данных. Функции СУБД. Категории пользователей СУБД. Система администрирования банком данных, ее компоненты и функции.

Типы и качество данных. Биологические базы данных. Первичные, курируемые и производные базы данных. Базы данных последовательностей нуклеиновых кислот. Геномные базы данных. Базы данных белковых последовательностей. Структурные базы данных. Протеомные базы данных. Базы данных метаболических путей.

Библиографические базы данных.

Банк UniProtKB/Swiss-Prot. Пространственная структура биополимеров. Банк PDB. Предсказание вторичной структуры белков. Предсказание третичной структуры белков по гомологии. Предсказание параметров спирали ДНК. Предсказание вторичной структуры РНК. Представление вторичной структуры РНК.

Выравнивание. Алгоритмы динамического программирования. Статистическая значимость выравнивания. Линейное и логарифмическое поведение веса выравнивания. Методы быстрого поиска сходства BLAST, FASTA.

Множественное выравнивание. Филогения. Методы кластеризации. Проблема переменной скорости эволюции.

Скрытые Марковские модели. Алгоритмы оптимального и апостериорного декодирования. Скрытые Марковские модели для выравнивания. Субоптимальные выравнивания.

Множественное выравнивание последовательностей. Динамическое программирование для множественного выравнивания. Прогрессивное выравнивание.

Вторичные структуры РНК. Методы предсказания оптимальных структур. Вычисление статистических сумм, субоптимальные структуры. Поиск консервативных структур.

Анализ и предсказание структуры белков. Стабильность и сворачивание белков.

Основы анализа пространственной структуры макромолекул. Поверхность макромолекулы, алгоритмы её вычисления. Гидрофобное ядро молекулы белка, алгоритмы его нахождения. Гидрофобность в глобулярных и мембранных белках. Структурные домены белков, алгоритмы их нахождения. Пространственное выравнивание структур белков. Структурные классификации доменов. Вычислительные методы оценки качества пространственной модели белка. Эволюция белковых структур. Классификация белковых структур. Предсказание и моделирование белковых структур. Совмещение структур и структурные выравнивания.

Моделирование пространственной структуры биологических макромолекул и их взаимодействия с лигандами. Анализ взаимосвязей "структура-активность" и "структура-свойство" фармакологических веществ. Прогнозирование фармакологических свойств новых веществ. Виртуальный скрининг и докинг лигандов. Конструирование de novo базовых структур новых лекарств.

Геномы, размер геномов бактерий и эукариот. Метагеномы. Контиги. Распирфровка геномов и сборка контигов. Структура геномов прокариот. Геном человека и млекопитающих. Особенности бактериальных геномов. Особенности геномов млекопитающих. Полиморфизмы человека.

Аннотация геномов. Предсказание генов. Функциональная аннотация. Использование сходства. Гомологи, ортологи и паралоги. Методы определения ортогологичности. Сравнительный анализ геномов. Метаболическая реконструкция.

Транскриптом. Методы определения транскриптомов. Методы анализа транскриптомов. Тканевая и стадия специфичность транскриптомов. Состав транскриптома. Анализ сплайсинга. Приложение к исследованию заболеваний и диагностики.

Типы регуляторных взаимодействий. Регуляторные каскады. Построение регуляторных сетей.

Протеом. Методы определения протеома. Пост-трансляционные модификации белков. Определение посттрансляционных модификаций. Участие модификаций белков в регуляторных каскадах.

Эпигеномика. Структура эпигенома. Методы определения эпигенома. Роль эпигенома в регуляции экспрессии генов.

Системная биология. Построение и анализ регуляторных сетей. Роль системной биологии в поиске мишеней для лекарственных средств.