



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, bendroji chemija, molekulinės biologijos pagrindai

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 moksliskai 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). - Programų 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 ir/arba duomenų analizės 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 užduočių tinklalapyje ¹ .
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	paskaitos arba praktikos darbo diena	Testas iš 4 klausimų, apimančių jau išklaustų 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 klausimų, apimančių iki tol praeitas temas. Maksimali balų už atsakymus suma – iki 150 balų.

1. <https://saulius-grazulis.lt/~saulius/paskaitos/VU/bioinformatika-III/užduotys-praktikai>

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Praktikos darbų atsiskaitymai	50	Po kiekvieno praktikos darbo pagal nustatytą grafiką.	Studentai įkelia į virtualią mokymosi aplinką savo praktinio darbo rezultatus. Vertinimo kriterijai: teisingas programos veikimas, programavimo stilius ir programos teksto tvarkingumas; bendros dalyko žinios. Atliktos užduotys vertinamos subtraktyvia sistema: idealiai padaryta užduotis vertinama 100%; už kiekvieną padarytą klaidą atimamas klaidos svarbą atitinkantis balų skaičius (su paaiškinimu apie klaidos esmę ir svarbą). Vertinimui gali būti pasitelktos automatinės kodo analizės priemonės. Klaidų pataisymui gali būti skiriamos papildomos (neprivalomos) užduotys.
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 metodika: naudojant Moodle sistemos rubrikas arba subtraktyvią sistemą.
Egzaminas	15	Egzaminų sesija (galutinio atsiskaitymo laikotarpis)	Testas (virtuali mokymosi aplinka) iš klausimų, apimančių visas kurso temas. Kad studentai būtų prileisti prie egzamino, jie turi: 1. Atlikti bent vieną praktikos darbą ir surinkti teigiamą (didesnį už nulį) pratybų balą; 2. Sukaupti suminį balą už darbą per semestrą (iš praktikos darbų, tarpinio kontrolinio, darbo paskaitose, galimai kitų dėstytojų paskirtų užduočių), kad, parašius egzamino kontrolinį, būtų įmanoma pasiekti patenkinamo pažymio balą (t. y. balą, užtikrinantį bent pažymį „5“); Egzamino kontrolinis yra būtinas visiems nepriklausomai nuo surinkto balų skaičiaus. Studentams, neatvykusiems į egzaminą, žiniaraštyje bus žymima „neatvyko“. Egzaminate būtina surinkti bent 50% egzamino balo.
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).
Eksterno tvarka			Egzamino laikymas eksternu leidžiamas dalyką koordinuojančio dėstytojo sprendimu. Kaip taisyklė, egzaminas eksternu leidžiamas labai geriems studentams ir studentėms (akademinis vidurkis ne mažiau kaip 8), kurie sugeba savarankiškai įsisavinti dalyką ir jiems reikia tik žinių įvertinimo iš kvalifikuoto VU atstovo. Egzaminui eksternu taikomi tokie patys reikalavimai, kaip ir įprastam egzaminui. Studentas, pretenduojantis į laikymą eksternu, negali turėti akademinio skolo; leidžiamos tik neakademinės skolos.

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. <i>Journal of Global Optimization</i>		Springer
Kabsch, W.	1976	A solution for best rotation to relate two sets of vectors. <i>Acta Crystallographica A</i>	vol. 32, pp. 922-923	IUCr/Wiley
	1968-2058	<i>Originalūs straipsniai apie bioinformatinius algoritmus iš Acta Crystallographica, Bioinformatics ir kitų žurnalų</i>		IUCr, Wiley, OUP, Academic Press, Springer, etc.