

### **ХІІІ МІЖНАРОДНА ЛІТНЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦІЯ «МОЛЕКУЛЯРНА МІКРОБІОЛОГІЯ І БІОТЕХНОЛОГІЯ» за тематичним напрямом «Біоінформатика»**

З 4 червня по 20 червня 2018 року на кафедрі мікробіології, вірусології та біотехнології Одеського національного університету імені І. І. Мечникова спільно з Інститутом мікробіології і вірусології імені Д. К. Заболотного НАН України, за підтримки Товариства мікробіологів України імені С. М. Виноградського та Співки біологів і біотехнологів Одеси проходила ХІІІ Міжнародна Літня школа-конференція «Молекулярна мікробіологія і біотехнологія» за основним тематичним напрямом Біоінформатика.

На сьогоднішній день цей напрямок стрімко розвивається і зачіпає не тільки області чистої біологічної науки. Для тих, хто хоче працювати в галузі геноміки, протеоміки, метагеноміки, танскріптоміки, метаболоміки і інших «омік» від біоінформатики мало класичної біологічної освіти. Вимоги до молодих вчених-біоінформатиків набагато серйозніші і їм необхідні додаткові знання в області основ програмування, роботи з системою Unix / Linux, розуміння організації і побудови запитів в базах даних і розуміння багатьох специфічних програм для кожної з вище перерахованих областей біоінформатики.

Саме тому організатори літньої школи-конференції при Одеському національному університеті вважали за необхідне присвятити останні дві школи напрямку Біоінформатика. Основним завданням школи було висвітлити базові моменти, з якими зіткнуться молоді вчені, які бажають реалізувати себе в даній перспективній галузі науки, яка активно розвивається за кордоном. Недостатня активність в пропагуванні біоінформатики в Україні було ще одним додатковим аргументом при прийнятті рішення про присвячення Літньої школи цьому напрямку.

Серед слухачів Літньої школи-конференції були молоді вчені та аспіранти з університетів та наукових закладів України (Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, Дніпровського національного університету ім. Олеса Гончара, Запорізького національного університету, Національного наукового центру «Інститут експериментальної і клінічної ветеринарної медицини», м. Харків, Київський національний університет імені Тараса Шевченка).

У роботі школи як лектори брали участь заступник директора ІМВ НАНУ завідувач відділом молекулярної генетики бактеріофагів, член-кор. НАНУ, д.б.н. Товкач Федір Іванович, д.б.н., професор, член-кор. НАНУ, завідувач відділу білкової інженерії та біоінформатики Інституту молекулярної біології і генетики НАНУ, завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики Київського національного університету імені Тараса Шевченка Корнелюк Олександр Іванович, д.б.н., професор, член-кор. НАНУ, завідувач відділу молекулярної біології Інституту біохімії ім. О. В. Палладіна Мінченко Олександр Григорович, к.б.н., с.н.с., зав. лабораторією біоінформатики та структурної біології Інституту харчової біотехнології та геноміки НАНУ Карпов Павло Андрійович, ст.н.с. Інституту біохімії ім. О. В. Палладіна НАН України, секретар Української асоціації біобезпеки (УАБ), к.б.н. Гергалова



Галина Леонідівна, доцент кафедри мікробіології, вірусології та біотехнології ОНУ імені І. І. Мечникова к.б.н. Васильєва Наталія Юріївна, доцент кафедри комп'ютерної алгебри та дискретної математики ОНУ імені І. І. Мечникова, к.фіз-мат.н. Савастру Ольга Володимирівна, професор Інституту сільського господарства м. Нант (Франція) Томас Ертле, професор університету Брайтона Сергій Міхаловський, науковий співробітник університету Брайтона к.х.н. Любов Міхаловська, професор Департаменту медичних біосенсорів Алексій Шмідт та науковий співробітник кафедри медичної хімії та біофізики університету Умеа к.б.н. Олена Рахімова (Швеція).

Лекційний курс ХІІІ Літньої школи з молекулярної мікробіології і біотехнології висвітлював питання бактеріальної геноміки, геноміки бактеріофагів і островів патогенності, геноміки плазмід, сучасного погляду на еволюцію мікроорганізмів, наукових концепцій в молекулярній мікробіології, бактеріальних транспозонів, IS-елементів, інтегронів і генетичних касет, структурної біоінформатики. Досить багато часу було присвячено питанням клонування білків.

Одним з занять для слухачів школи були лекції проф. Сергія Міхаловського, які він присвятив актуальним питанням подання проектів і пошуку партнерів серед світової наукової спільноти. На цих заняттях перед слухачами були детально розкриті підходи і вимоги до написання спільних проектів. На своєму прикладі він розповідав слухачам школи як необхідно проводити підготовки до написання проектів, пошуку партнерів, демонстрував ресурсні сайти, які необхідно відвідати перед написанням подібних проектів.

Протягом першого тижня лекційних занять студенти ХІІІ Літньої школи-конференції мали можливість прослухати лекції проф. Алексія Шмідта, які були присвячені актуальним в біології проблемам клонування білків. Були детально розглянуті усі етапи, необхідні для проведення даного дослідження. Перед студентами, протягом декількох лекційних днів, на основі практичних завдань, продемонстровано етапи клонування, експресії, виділення і очищення білків.

Не менш цікавими і актуальними були лекції Олени Рахімової присвячені темі «Quality in Science». Правила, нормативи і, так би мовити, «підходи за замовчанням» до якості матеріалу, який планується опублікувати, дозволили слухачам зрозуміти чому в деяких випадках статті не можна віднести до наукових матеріалів, а скоріше до газетних публікацій.

Член-кор. НАНУ Федір Товкач – один з організаторів нашої школи прочитав лекції присвячені організації хромосоми *Escherichia coli* з висвітленням останніх опублікованих робіт по цій темі і загальної топології бактеріальних геномів та лекції, присвячені бактеріофагам і вірусам.

Цікавими і інформативними були лекції професора Томаса Ертле (університет Нант, Франція), який на власних дослідженнях показав необхідність інтеграції підходів класичної мікробіології і методів біоінформатики *in silico*.

Більша частина часу була віддана саме практичним заняттям. Орієнтуючись на тенденції світової спільноти і вимоги до більшості програм біоінформаційного напрямку, були проведені заняття з ознайомлення з операційною



системою (ОС) Linux. Приклади, які відпрацьовували на заняттях, дозволили студентам зрозуміти основні принципи роботи з файлами в терміналі.

Були проведені практичні заняття по основах роботи з мовою програмування R. Слухачі школи мали можливість ознайомитись с R GNU, зрозуміти основні принципи програмування в R, попрацювати з основними пакетами, які використовуються для первинної обробки біоінформаційних даних.

Оскільки основи аналізу неможливі без розуміння основних форматів та типів даних, які використовуються в біоінформатиці, паралельно проходили заняття присвячені біологічним базам даних, підходам до пошуків необхідної інформації, її завантаженню та збереженню. На початку школи основну увагу приділяли NCBI і роботі саме в цій базі. Слухачів коротко ознайомили з правилами побудови складних запитів в NCBI, роботі з PubMed, BLAST, Primer-BLAST. Додатково були розглянуті такі програми як Primer3, Primer3Plus, Oligoanalyzer і інші.

Завершували цей блок літньої школи-конференції лекції та практичні заняття з філогенетичного аналізу. Об'єднуючи отримані раніше знання слухачі школи мали можливість провести пошук, відбір та сортування інформації в базі даних, сформувати файл, який містить первинну генетичну інформацію у необхідному форматі і провести філогенетичну реконструкцію як в он-лайн програмах так і в програмі R GNU. Додатковий час було приділено методам кластерного аналізу, як окремого напрямку в біології, так і основі для філогенетичної реконструкції.

Велика частина лекційного часу була присвячена питанням біоінформатики і її застосуванню в сучасній біології, а саме структурній біоінформатиці. Заняття з Павлом Карповим були присвячені особливостям досліджень *in silico* та взаємодії біоінформатики з іншими галузями, специфічності генетичного коду та сучасним методам його аналізу; методам вирівнювання послідовностей, фолдингу білків, аналізу тривимірних структур та ідентифікації функції білка на підставі структури і доменного складу. Додатково були розглянуті питання пов'язані з використанням бібліотек низькомолекулярних хімічних сполук: PubChem, ZINC, RCSB PDB Ligands (Ligand Expo), KEGG LIGAND, BindingDB; бібліотеки макромолекулярних мішеней, лігандів і ліганд-білкових комплексів, як основи раціонального драг-дизайну, молекулярного докінгу та високопропускного віртуального скринінгу. Слухачі отримали навички роботи з доменами: прогноз доменної архітектури *in silico*; інструменти SMART, Pfam, PROSITE. HMM (Hidden Markov Model's); порівняння та вирівнювання структури білків, навчилися візуалізувати тривимірні молекулярні моделі *in silico*.

Член-кор. НАНУ Олександр Корнелюк доповнював отриману на практичних заняттях інформацію теоретичною базою, пояснюючи слухачам основні підходи до аналізу білків з точки зору протеоміки і біоінформатики. Він розповів слухачам про появу нових можливостей для створення нових лікарських препаратів шляхом комп'ютерного дизайну і про розроблений та впроваджений в Інституті молекулярної біології і генетики комп'ютерний сервіс для аналізу динаміки білків у віртуальній лабораторії MolDynGrid, який є частиною проекту розвитку Грід-сегменту НАН України з обчислювальними



кластерами Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Інститутів молекулярної біології і генетики, клітинної біології і клітинної інженерії, теоретичної фізики тощо.

Дуже цікавими були лекції член-кор. НАНУ Олександра Мінченка, присвячені молекулярним механізмам стресу клітини, а саме стресу ендоплазматичного ретикулула як фундаментального явища, що забезпечує перебіг різних метаболічних та фізіологічних процесів у нормі, особливо в деяких спеціалізованих клітинах із високим рівнем синтезу секреторних протеїнів.

Останній тиждень школи-конференції був присвячений ще одному не біологічному, але важливому біоінформаційному аспекту – навичкам програмування з використанням Python и Віорpython. На практичних заняттях слухачів школи доц. кафедри комп'ютерної алгебри та дискретної математики ОНУ Ольга Савастру ознайомила з основами роботи з використанням Python і основними пакетами та бібліотеками для базового біоінформаційного аналізу даних.

Наполегливість слухачів і їх бажання опанувати максимальну кількість матеріалу і щире бажання викладачів поділитися тим, що вони знають і вміють нівелювали «підводні камені» при знайомстві класичної біології та прикладних аспектів біоінформатики.

Доцент кафедри мікробіології, вірусології і біотехнології  
Васильєва Н. Ю.

