

A Bioinformatika előadások és gyakorlatok tematikája - 2017

1. Mi a bioinformatika?

szept. 11.

A kurzus bemutatása: Mikor van szükség számítógépre a biológiai kutatások során? A bioinformatika jelentése szűkebb és tágabb értelemben. Története, alkalmazási területei. Trendek a biológiai kutatásban. Bioinformatika a világhálón. A leggyakrabban használt bioinformatikai módszerek, programcsomagok áttekintése. Linux bevezetés.

Fazekas Dávid

Gyakorlat: Számítógép használata a biológiában: Bevezetés

A gyakorlatok menetének ismertetése. A gyakorló bemutatása. Bevezetés a Linux operációs rendszer használatába: grafikus felület, szövegszerkesztők, képmegjelenítők, programindítás. Bioinformatikai szerverek, honlapok.

Ari Eszter, Demeter Amanda, Fazekas Dávid

2. Molekuláris biológiai adatbázisok

szept. 18.

Az adatbázisok felépítése, relációs adatbázisok. Az adatbázisok szerkezete és tartalma. A molekuláris biológiai adatbázisok alkalmazása a biológiában. Nukleotid- (EMBL, GenBank) és fehérjeszekvencia (PIR, UniProt, (SWISS-PROT, TrEMBL)) adatbázisok. Szekvencia-adatbázis fájl formátumok. ID mapping. Egyéb adatbázisok (Gene Ontology).

Fazekas Dávid

Gyakorlat: Molekuláris biológiai adatbázisok használata

Az NCBI adatbázis honlapjának bemutatása. Az Uniprot fehérje-adatbázis megismerése. Információkeresés a molekuláris biológiai adatbázisokban: az NCBI integrált keresőrendszerével. Keresés a Uniprot-on: Retrieve, ID mapping. A UGENE szoftver bemutatása. Szekvenciák keresése és letöltése a UGENE segítségével.

Ari Eszter, Demeter Amanda, Fazekas Dávid

3. Szekvenciák összehasonlítása és illesztése

szept. 25.

Fogalmak tisztázása: szekvencia hasonlóság, homológia. Páros szekvencia illesztések, páronkénti összehasonlítások: „Dot-plot”. Hasonlóság-pontozási rendszerek, helyettesítési mátrixok: egységmátrix, PAM, BLOSUM. Optimális globális és lokális illesztés, dinamikus programozási algoritmusok. Hézagbüntetések. Többszörös szekvenciaillesztési módszerek: progresszív illesztés a ClustalW program példáján.

Ari Eszter

Gyakorlat: A számítógépes szekvenciaelemzés alapjai, szekvenciaillesztés

Szekvenciakezelés, különböző szekvencia-fájlformátumok. Számítógépes szekvenciaelemző programok, programcsomagok működésének bemutatása az UGENE szoftveren keresztül: Dot-plot, szekvenciák páros és többszörös illesztése.

Ari Eszter, Fazekas Dávid

4. Szekvenciák keresése hasonlósági alapon

okt. 2.

Heurisztikus keresés: a BLAST algoritmus és program. Statisztikai alapok: a találatok szignifikanciájának becslése. A *false* pozitív találatok okai és kiszűrésük: kis komplexitású régiók, repetitív szekvenciák. A BLAST különböző változatai, egyéb hasonlósági kereső programok.

Fazekas Dávid

Gyakorlat: Hasonlósági keresések szekvencia-adatbázisokban

A BLAST programok használata online és a UGENE szoftverrel. Szekvencia hasonlósági keresések távoli adatbázisokban. Az eredmények értékelése, letöltése, illesztése és szerkesztése.

Ari Eszter, Fazekas Dávid, Gerber Dániel

5. A molekuláris filogenetikai elemzések elméleti háttére I. **okt. 9.**

A filogenetikai elemzések alkalmazási lehetőségei és áttekintése: filogenetikai szignál, filogenetikai fák. Evolúciós változások, távolságok becslése: nukleotid szubsztitúciós modellek. A filogenetikai rekonstrukció módszerei. Távolság-alapú módszerek: neighbor-joining. Karakter-alapú módszerek: a maximális parszimónia módszer. Konszenzus fák. Statisztikai tesztek: Bootstrap analízis.

Ari Eszter

Gyakorlat: Molekuláris filogenetikai elemzések a gyakorlatban

A PHYLIP programcsomag működésének bemutatása. Online használható szoftverek. Filogenetikai rekonstrukció elvégzése távolság alapján (UGENE) és maximális parszimónia módszerrel (online). Fák megjelenítése és szerkesztése a FigTree programmal.

Ari Eszter, Fazekas Dávid, Gerber Dániel

6. A molekuláris filogenetikai elemzések elméleti háttére II. **okt. 16.**

A Likelihood alapjai, a Maximális Likelihood módszer. A Bayes statisztika alapjai, a Markov lánc Monte Carlo módszer, fák számítása Bayes alapú módszerrel. Az adatainkra leginkább illeszkedő evolúciós modell választása.

Ari Eszter

Gyakorlat: Molekuláris filogenetikai elemzések a gyakorlatban

Az adatainkra leginkább illeszkedő evolúciós modell kiszámítása. Filogenetikai rekonstrukció elvégzése maximális likelihood és Bayes statisztikai módszerrel (UGENE). Az NCBI Taxonomy adatbázis megismerése, taxonómiai besorolás letöltése külső szoftverrel. A számított fák összehasonlítása a taxonómiai besorolás alapján kapott fával.

Ari Eszter, Fazekas Dávid, Gerber Dániel

7. Nemzeti ünnep, nincs oktatás (a gyakorlatok meg lesznek tartva!) **okt. 23.**

Gyakorlat: Genom adatbázisok

Az ensembl genom adatbázis megismerése. A Biomart rendszer használata.

Ari Eszter, Fazekas Dávid

ősz szünet

okt. 30 – nov. 3.

8. Genomika és transzkriptomika **nov. 6.**

Genom szekvenálási eljárások. A szekvenátorokból kinyert adatok bioinformatikai feldolgozása. Genom összeállítás (*assembly*), annotáció, SNP analízis. A génexpresszió high-throughput vizsgálata: A microarray technika bemutatása. Microarray adatsorok feldolgozásának és alkalmazásának lehetőségei. RNA-seq adatok előállítás és elemzése. *De novo* assembly, illesztés (*mapping*), expressziós különbségek vizsgálata. Funkcionális dúsulási (*enrichment*) analízis.

Ari Eszter

Gyakorlat: Expressziós különbségek elemzése microarray és RNA-seq adatok alapján

Az NCBI GEO adatbázis megismerése. Differenciál expresszió számítás. Enrichment analízis.

Ari Eszter, Fazekas Dávid

9. Hálózatbiológia, rendszerbiológia I. + 1. ZH (1-6. előadás anyagából) **nov. 13.**

Bevezetés a hálózat- és rendszerbiológiába.

Fazekas Dávid

Gyakorlat: Cytoscape I.

Bevezetés a Cytoscape hálózatelemző és ábrázoló program használatába.

Ari Eszter, Fazekas Dávid

10. Hálózatbiológia, rendszerbiológia II. **nov. 20.**

Bevezetés a hálózatok világába: topológia, hierarchia és dinamika. A molekuláris hálózatok típusai és forrásai. Fehérje-fehérje kapcsolatok (FFK) gyűjtésének lehetőségei. Leggyakrabban használt

FFK *high-throughput* módszerek bemutatása, előnyeik és hátrányaik ismertetése. Molekuláris hálózati adatbázisok bemutatása.

Fazekas Dávid

Gyakorlat: Cytoscape II.

Szövetspecifikus hálózat készítése Cytoscape programmal.

Ari Eszter, Demeter Amanda, Fazekas Dávid

11. Hálózatbiológia, rendszerbiológia III.

nov. 27.

Molekuláris hálózatok a sejtben és hálózat dinamika.

Demeter Amanda, Fazekas Dávid

Gyakorlat: Cytoscape III.

Dinamikus molekuláris hálózat szimulációja.

Ari Eszter, Demeter Amanda, Fazekas Dávid

12. Szerkezeti bioinformatika

dec. 4.

Térszerkezet meghatározási módszerek. A Protein Data Bank (PDB) adatbázis felépítése és használata. A PDB formátum. Fehérjeszerkezetek mint modellek. Kísérletileg meghatározott szerkezetek minőségének elemzésének alapelvei. Másodlagos szerkezeti elemek hozzárendelése és szerkezeti domének azonosítása. A térszerkezetek osztályozásának alapjai, hierarchikus adatbázisok. Fehérjeszerkezetek összehasonlítása, algoritmusok és alkalmazások.

Dosztányi Zsuzsa

Gyakorlat: Fehérjék szerkezeti bioinformatikája

Ismerkedés a PDB adatbázissal: szerkezetkeresés, letöltés. Térszerkezeti adatok megjelenítésére alkalmas programok. Az egyes régiók, aminosavak, oldalláncok kiemelése. Szerkezetek összehasonlítása.

Dosztányi Zsuzsa, Erdős Gábor

13. 2. ZH (8-12. előadás anyagából)

dec. 11.

Gyakorlat: Gyakorlati konzultáció a beadandó feladatokról

Ari Eszter, Demeter Amanda, Fazekas Dávid

A számonkérés módja

Előadás jegy:

A félév során 2 darab 45 perces ZH lesz az előadások anyagából. Az ezekre kapott jegyeket átlagoljuk.

1-es ZH jegy (bármelyik ZH-ra vonatkoztatva), hiányzás vagy javítani kívánt jegy esetén szóbeli vizsgát kell/lehet tenni a vizsgaidőszakban. Elég csak abból az anyagrészből vizsgázni, amelyik ZH nem sikerült.

A jegyek átlagának számításakor az $x,5$ -öt felfelé kerekítjük.

Gyakorlati jegy:

Feltétele: Aktív részvétel a gyakorlatokon. (A gyakorlatokról maximum 3 alkalommal lehet hiányozni. Jegyzőkönyvet nem kell beadni.)

Egy gyakorlati beadandó feladat elkészítése a félév végén, a gyakorlatokon elsajátított tudás és eredmények felhasználásával.

A beadandó feladatokat 3 fős szabadon választott csoportokban készítik el a hallgatók.