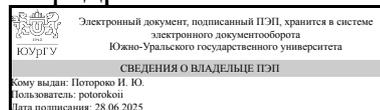


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



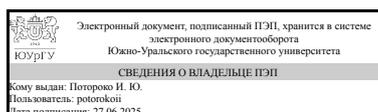
И. Ю. Потороко

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.С0.18.02 Моделирование белковых структур
для специальности 06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика
уровень Специалитет
специализация Биоинженерия и биоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Пищевые и биотехнологии

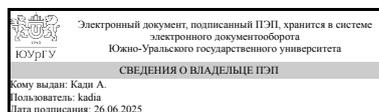
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика, утверждённым приказом Минобрнауки от 12.08.2020 № 973

Зав.кафедрой разработчика,
д.техн.н., проф.



И. Ю. Потороко

Разработчик программы,
ассистент



А. Кади

1. Цели и задачи дисциплины

Сформировать знания и навыки в области моделирования трехмерных структур белков с использованием биоинформационных и молекулярных инструментов, применяемых в биомедицине, биотехнологии и фармакологии. задачи дисциплины: Ознакомить с основами пространственной организации белков; Изучить методы предсказания и построения 3D-моделей белков; Освоить инструменты гомологического моделирования и докинга; Развить навыки анализа структурных данных и визуализации белков; Научиться использовать программное обеспечение для моделирования.

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина посвящена методам построения и анализа трехмерных структур белков на основе аминокислотной последовательности и гомологии. Рассматриваются инструменты гомологического моделирования, молекулярного докинга и современные подходы, включая AlphaFold и машинное обучение. Студенты изучают работу с базами данных, программами визуализации и оценкой качества моделей. Полученные знания применяются в биомедицине, биотехнологии и разработке лекарств.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-2 Способен использовать цифровые технологии для реализации научно-исследовательских проектов в области биоинженерии и биоинформатики	Знает: методологию создания компьютерных программ для анализа структуры и свойств белков Умеет: разрабатывать программы для работы с белковыми структурами Имеет практический опыт: создания компьютерных программ и приложений для работы с белковыми структурами
ПК-5 Способен осуществлять поиск информации и данных в специализированных базах данных; анализировать и передавать информацию с использованием цифровых средств для решения задач биоинженерии; проводить оценку достоверности информации, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Знает: методологию создания компьютерных программ для анализа структуры и свойств белков Умеет: разрабатывать программы для работы с белковыми структурами Имеет практический опыт: создания компьютерных программ и приложений для работы с белковыми структурами

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Языки программирования, Биоинформатика, Производственная практика (технологическая, проектно-технологическая) (4 семестр)	Компьютерные технологии и моделирование в биологии, Базы биологических данных, Компьютерная метабомика, Биоинформатика последовательностей,

	Язык R и его применение в биоинформатике, Производственная практика (преддипломная) (10 семестр)
--	--

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Языки программирования	Знает: Основы программирования на Python (синтаксис, структуры данных, ООП); библиотеки для биоинформатики (Biopython, NumPy, SciPy, Pandas, Matplotlib/Seaborn); методы обработки и визуализации биологических данных; основы алгоритмизации и оптимизации кода. Умеет: Разрабатывать скрипты для обработки биологических данных (последовательностей ДНК/РНК, белков); применять Python для анализа данных (статистика, машинное обучение); интегрировать готовые биоинформатические инструменты в собственные программы. Имеет практический опыт: Написания и отладки кода на Python; работы с биоинформатическими библиотеками (Biopython, scikit-bio); автоматизация рутинных задач анализа данных.
Биоинформатика	Знает: принципы анализа полученных знаний и данных из различных источников информации Умеет: использовать полученные знания в профессиональной деятельности, самостоятельно анализировать информацию при решении задач по специальности Имеет практический опыт: применения системного мышления, самостоятельной работы с различными источниками информации и базами данных по вопросам профессиональной сферы
Производственная практика (технологическая, проектно-технологическая) (4 семестр)	Знает: основы проведения критического анализа проблемных ситуаций на действующего предприятия, использовать методы биоинженерии и биоинформатики для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами и анализировать полученные результаты Умеет: проводить критический анализ проблемных ситуаций на действующем предприятии, методы биоинженерии и биоинформатики и методы анализа результатов исследования Имеет практический опыт: Проведения анализа проблемных ситуаций на действующем предприятии, разработки инновационных продуктов с применением методов биоинженерии и биоинформатики

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч., 102,25 ч.
контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		7	
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108	
<i>Аудиторные занятия:</i>	96	96	
Лекции (Л)	48	48	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	48	48	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	5,75	5,75	
Аудиторная	5,75	5,75	
Консультации и промежуточная аттестация	6,25	6,25	
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет	

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Структура белков и принципы моделирования	24	12	0	12
2	Гомологическое моделирование	24	12	0	12
3	Докинг и взаимодействие белков	24	12	0	12
4	Современные технологии и ИИ в моделировании	24	12	0	12

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Первичная, вторичная и третичная структура белка	4
2	1	Методы анализа белков	4
3	1	Свойства аминокислот	4
4	2	Принципы гомологического моделирования	4
5	2	Инструменты: SWISS-MODEL, Modeller	4
6	2	Проверка моделей	4
7	3	Основы молекулярного докинга	4
8	3	Типы взаимодействий в докинге	4
9	3	Подбор лигандов	4
10	4	AlphaFold и новые подходы	4
11	4	Машинное обучение в структурной биологии	4
12	4	Перспективы ИИ	4

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	1	Работа с базами PDB	4
2	1	Распознавание вторичной структуры	4
3	1	Анализ аминокислотной последовательности	4
4	2	Построение модели по шаблону	4
5	2	Оценка качества модели	4
6	2	Сравнение с экспериментальной структурой	4
7	3	Автоматическая сборка комплекса	4
8	3	Визуализация в PyMOL	4
9	3	Выполнение простого докинга в AutoDock	4
10	4	Анализ моделей AlphaFold	4
11	4	Прогнозирование структур с ИИ	4
12	4	Использование ColabFold	4

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Аудиторная	- Игнасимуту С. Основы биоинформатики. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2007. 320 с. - Знаменский С.В. Моделирование задачи оптимального выравнивания последовательностей // Программные системы и приложения. 2014. Т.5, №4. С.257–267. - Габасов Р., Кириллова Ф.М. Основы динамического программирования. Минск: Изд-во БГУ, 1975. 262 с.	7	5,75

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	7	Промежуточная	Итоговое тестирование	-	30	Тест включает 15 вопросов. Каждый вопрос оценивается в 2 балл.	зачет

		аттестация				Максимальный балл - 30. Пороговое значение для прохождения теста и получения зачета - 18 баллов	
2	7	Текущий контроль	Защита лабораторных работ	1	20	Максимальное количество баллов за КМ - 20. Оценка за лабораторную складывается из: - оценки за оформление отчета: - - отчет оформлен по требованиям, представлен в установленные сроки, все задания выполнены в полном объеме - 1 балл - - отчет оформлен не по требованиям, представлен позже установленного срока, выполнены не все задания - 0 баллов; - оценки за защиту работы: - - студент ответил на все вопросы, показал хорошее владение теоретическим материалом, способен объяснить результаты работы, владеет терминологией - 4 балла - - студент ответил на большинство вопросов, испытывает затруднение с отдельными вопросами, может объяснить результаты работы, использует соответствующую терминологию - 3 балла - - студент затрудняется ответить на вопросы, или допускает серьезные неточности в ответах, способен объяснить результаты работы, слабо владеет терминологией - 2 балла; - - студент не может ответить на вопросы, не способен объяснить результаты работы, не владеет терминологией - 0 баллов.	зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
зачет	Проведение промежуточной аттестации не является обязательным. Студенты, имеющие по результатам текущего контроля рейтинг по дисциплине 60 и более % получают зачет автоматом. Тест включает 30 вопросов. Каждый вопрос оценивается в 1 балл. Максимальный балл - 30. Пороговое значение для прохождения теста и получения зачета - 18 баллов.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ	
		1	2
ПК-2	Знает: методологию создания компьютерных программ для анализа структуры и свойств белков	+	
ПК-2	Умеет: разрабатывать программы для работы с белковыми структурами	+	
ПК-2	Имеет практический опыт: создания компьютерных программ и приложений для работы с белковыми структурами	+	
ПК-5	Знает: методологию создания компьютерных программ для анализа структуры		+

	и свойств белков		
ПК-5	Умеет: разрабатывать программы для работы с белковыми структурами		+
ПК-5	Имеет практический опыт: создания компьютерных программ и приложений для работы с белковыми структурами		+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Беседин А. А. Моделирование систем автоматического управления на ПЭВМ : учеб. пособие по лаб. работам / А. А. Беседин, В. И. Долбенков, Т. К. Подлинева ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Системы упр.; ЮУрГУ. - Челябинск : Издательство ЮУрГУ, 1997. - 44, [1] с.

2. Ширяев В. И. Управление фирмой : Моделирование, анализ, управление : учеб. пособие для вузов по специальности 061800 "Мат. методы в экономике" и другим экон. специальностям, по направлению "Прикладная математика" / В. И. Ширяев, И. А. Баев, Е. В. Ширяев. - 2-е изд.. - М. : URSS : ЛИБРОКОМ, 2009. - 271 с. : ил.

3. Барташевич Е. В. Стереохимия и симметрия молекул : учеб. пособие для бакалавров по направлению 020100 "Химия" / Е. В. Барташевич, Д. К. Никулов ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Хим. фак.; ЮУрГУ. - Челябинск : Издательский Центр ЮУрГУ, 2011. - 72, [1] с.. URL: http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000473583

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Стереохимия и симметрия молекул

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Стереохимия и симметрия молекул

Электронная учебно-методическая документация

Нет

Перечень используемого программного обеспечения:

Нет

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Нет

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Не предусмотрено