

**АВТНОМНАЯ НЕКОММЕРЧЕСКАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ  
ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»  
(АНОО ВО «УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»)**

---

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Дизайн белков**

Уровень образования:	высшее образование – программа магистратуры
Направление подготовки:	06.04.01 Биология 09.04.03 Прикладная информатика
Направленность (профиль):	Биоинформатика

## 1. Общая характеристика дисциплины

1.1. Цель: сформировать навыки применения методов дизайна белков и свободного применения распространенных и доступных подходов для решения задач направленной инженерии биомолекул.

1.2. Задачи: изучить основные подходы и научиться применять приемы экспертного и алгоритмического дизайна биомолекул.

1.3. Общая трудоемкость: 4 з.е.

1.4. Планируемые результаты обучения:

Формируемые компетенции (код компетенции, формулировка)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (индикаторы достижения компетенций)
ПК-1. Способен применять фундаментальные математические и естественнонаучные знания для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии	ИПК-1.1. Знает фундаментальные основы математики, биологии и других естественных наук
	ИПК-1.2. Применяет фундаментальные знания математики, биологии и других естественных наук для постановки и решения исследовательских и практических задач
	ИПК-1.3. Анализирует современные проблемы в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии, формулирует гипотезы и вырабатывает подходы для решения исследовательских и практических задач
ПК-2. Способен разрабатывать оригинальные алгоритмы и программные средства, в том числе с использованием современных информационных технологий, для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии	ИПК-2.1. Знает современные алгоритмы, средства разработки и программные средства, а также принципы написания программ на различных языках программирования
	ИПК-2.2. Осуществляет анализ и выбор методов решения профессиональных задач на основе теоретических знаний в области информационных технологий
	ИПК-2.3. Разрабатывает оригинальные алгоритмы и программные средства для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии
ПК-3. Способен разрабатывать и анализировать математические модели живых систем на различных иерархических уровнях их организации	ИПК-3.1. Знает основные положения, терминологию и методологию в области компьютерного моделирования живых систем
	ИПК-3.2. Применяет методы компьютерного моделирования живых систем для решения исследовательских и практических задач

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»	Лист 3 Листов 10
-------------------------------	--	---------------------

	ИПК-3.3. Разрабатывает и анализирует математические модели живых систем на различных иерархических уровнях их организации
ПК-6. Способен самостоятельно проводить расчетные работы и исследования в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии, применяя навыки работы с высокотехнологичным лабораторным оборудованием	ИПК-6.1. Применяет классические методы решения задач, современные программные комплексы и навыки работы с высокотехнологичным лабораторным оборудованием для проведения расчетных работ и исследований
	ИПК-6.2. Проводит расчетные работы и исследования, осуществляет обработку, анализ и интерпретацию биомедицинских и биотехнологических данных
	ИПК-6.3. Оформляет результаты расчетных работ и исследований в соответствии с требованиями к отчетной документации

## 2. Структура и содержание дисциплины (модуля)

### 2.1. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной деятельности:

Виды учебной деятельности	3 семестр	Всего
<b>Контактная работа обучающихся с преподавателем, всего ч.</b>	52	52
Лекционные занятия, ч.	24	24
Практические (семинарские) занятия, ч.	24	24
Лабораторные занятия, ч.	x	x
Промежуточная аттестация – экзамен, ч	4	4
Промежуточная аттестация – зачет с оценкой, ч	x	x
Промежуточная аттестация – зачет, ч	x	x
<b>Самостоятельная работа обучающихся, всего ч.</b>	92	92
<b>Общая трудоемкость, ч.</b>	144	144
<b>Общая трудоемкость, з.е.</b>	4	4

### 2.2. Структура дисциплины (модуля) по разделам (темам) и видам учебной деятельности:

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Лекционные занятия, ч	Практические (семинарские) занятия, ч	Лабораторные занятия, ч	Промежуточная аттестация, ч	Самостоятельная работа, ч	Всего, ч	Форма текущего контроля / промежуточной аттестации
Раздел 1. Введение в SBDD.	2	2			5	9	Устный опрос, контрольные работы, проектные

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»					Лист 4 Листов 10
-------------------------------	--	--	--	--	--	---------------------

						работы, тестирование
Раздел 2. Введение в дизайн белков.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 3. Дизайн стабильности белков.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 4. Валидация дизайна стабильности.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 5. Дизайн карманов связывания малых молекул с учетом динамики.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 6. Валидация дизайна карманов связывания.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 7. Дизайн хода остова.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 8. Валидация дизайна ферментов, вычисление барьера активации.	2	2			10	14 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 9. Дизайн ферментов.	2	2			5	9 Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»	Лист 5 Листов 10
-------------------------------	--	---------------------

Раздел 10. Машинное обучение в задачах дизайна биополимеров	2	2			6	10	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 11. Журнальный клуб	4	4			6	10	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Промежуточная аттестация				4		4	Экзамен
Итого	24	24	x	4	92	144	

### 2.3. Содержание разделов (тем) дисциплины (модуля):

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Содержание разделов (тем) дисциплины (модуля)
Раздел 1. Введение в SBDD.	Докинг, виртуальный скрининг. FBDD, объединение скаффолдов. Дизайн пептидных лигандов. PROTACs, дизайн линкеров.
Раздел 2. Введение в дизайн белков.	Интегрирование информации из разных источников. Выявление горячих точек для внесения замен. Принципы дизайна: эволюционный дизайн, рациональный дизайн, комбинаторный дизайн.
Раздел 3. Дизайн стабильности белков.	Дисульфидный инжиниринг. Переупаковка гидрофобных ядер. Повышение термостабильности. Обзор методов предсказания ddG фолдинга при внесении замены.
Раздел 4. Валидация дизайна стабильности.	Физические и алхимические методы оценки успешности дизайна и вычисления ddG при внесении замены.
Раздел 5. Дизайн карманов связывания малых молекул с учетом динамики.	Концепции и модели связывания, энтальпийный и энтропийный вклады. Учет воды: структурированные водяные мостики и неструктурированная среда.
Раздел 6. Валидация дизайна карманов связывания.	Физические и алхимические методы вычисления свободной энергии связывания.
Раздел 7. Дизайн хода остова.	Дизайн петель, инсерций и делеций. Дизайн стабильных белков с заданным ходом остова.
Раздел 8. Валидация дизайна ферментов, вычисление барьера активации.	Валидация дизайна ферментов, вычисление барьера активации.
Раздел 9. Дизайн ферментов.	Стабилизация переходного состояния.
Раздел 10. Машинное обучение в задачах дизайна биополимеров	Машинное обучение в задачах дизайна биополимеров

### 2.4. Самостоятельная работа

Самостоятельная работа предусматривает: самостоятельное изучение теоретического материала, подготовку к ответам на семинарских заданиях, подготовку к текущему контролю и промежуточной аттестации, выполнение тестовых заданий по пройденным темам курса.

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»	Лист 6 Листов 10
-------------------------------	--	---------------------

### 3. Текущий контроль и промежуточная аттестация по дисциплине (модулю). Оценочные материалы

3.1. Текущий контроль успеваемости проводится в течение семестра в следующих формах:

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Форма текущего контроля	Оценочные материалы
Раздел 1. Введение в SBDD.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 2. Введение в дизайн белков.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 3. Дизайн стабильности белков.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 4. Валидация дизайна стабильности.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 5. Дизайн карманов связывания малых молекул с учетом динамики.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»	Лист 7 Листов 10
-------------------------------	--	---------------------

Раздел 6. Валидация дизайна карманов связывания.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 7. Дизайн хода остова.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 8. Валидация дизайна ферментов, вычисление барьера активации.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 9. Дизайн ферментов. Стабилизация переходного состояния.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 10. Машинное обучение в задачах дизайна биополимеров	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 11. Журнальный клуб	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования

### 3.2. Оценочные материалы для текущего контроля

Примерный перечень вопросов для устного опроса:

1. Ограничения метода докинга
2. Принцип эволюционного дизайна
3. Метод переупаковки гидрофобного ядра
4. Принцип алхимии
5. Роль энтропийного эффекта при дизайне кармана связывания
6. Дизайн хода остова петель
7. Концепция стабилизации переходного состояния
8. Метадинамика
9. trRosetta

Примерный перечень заданий для контрольных работ:

1. Проведите докинг данного вещества
2. Найдите белок предшественник
3. Предложите код для переупаковки
4. Напишите последовательность действий для реализации FER
5. Предложите псевдокод для метода Kinematic Closure

Примерный перечень тем групповых и индивидуальных проектов:

Препроектирование фермента, чтобы он научился расщеплять пластик.  
Сору-Paste активного сайта

Примерный перечень тестовых заданий:

1. Проведите докинг данного вещества
2. Найдите белок предшественник
3. Предложите код для переупаковки
4. Напишите последовательность действий для реализации FER
5. Предложите псевдокод для метода Kinematic Closure.

### 3.3. Формой промежуточной аттестации является экзамен.

Результаты промежуточной аттестации оцениваются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Оценка «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означает успешное прохождение промежуточной аттестации.

### 3.4. Оценочные материалы для промежуточной аттестации

Перечень вопросов для подготовки к экзамену:

1. Ограничения метода докинга
2. Принцип эволюционного дизайна
3. Метод переупаковки гидрофобного ядра
4. Принцип алхимии
5. Роль энтропийного эффекта при дизайне кармана связывания
6. Дизайн хода остова петель
7. Концепция стабилизации переходного состояния
8. Метадинамика
9. trRosetta

## 4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### 4.1. Перечень основной литературы:

Биотехнология: учебник и практикум для вузов / под редакцией Н. В. Загоскиной, Л. В. Назаренко. — 4-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2025. — 384 с.

### 4.2. Перечень дополнительной литературы:

1. Егорова Т.А. Основы биотехнологии / Т.А. Егорова, С.М. Клунова, Е.А. Живухина. – М.: Издат. центр Академия, 2003. – 208 с.
2. Глик Б. Молекулярная биотехнология. Принципы и применение / Б. Глик, Дж. Пастернак. – М.: Мир, 2002. – 589 с.
3. Егоров Н.С. Основы учения об антибиотиках / Н.С. Егоров. – М.: Наука, 2004. – 525 с.
4. Introduction to Algorithms / Cormen, Thomas H. MIT Press. 2009
5. Алгоритмы и структуры данных: Учебник / Белов В.В., Чистякова В.И. - М.: КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 240 с.

4.3. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю):

1. <https://collection.asdlib.org/>

4.4. Перечень современных профессиональных баз данных и ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. SEQanswers [Электронный ресурс] <http://seqanswers.com/> - информационный ресурс (дискуссионный форум) о методах высокопроизводительного секвенирования.

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Дизайн белков»	Лист 10 Листов 10
-------------------------------	--	----------------------

## 5. Материально-техническое и программное обеспечение дисциплины (модуля)

### 5.1. Материально-техническое обеспечение:

<i>Вид аудитории</i>	<i>Технические средства и оборудование</i>
<i>Учебная аудитория для проведения лекционных занятий</i>	Альфа 5.2 - учебная аудитория для проведения учебных занятий, предусмотренных программой магистратуры. Доска магнитно-маркерная поворотная BoardSYS Twist 100x160 ПО-15Ф 1 шт. Флипчарт 70*100 на роликах 1 шт. Стол-кафедра 1 шт. Стол аудиторный 1 шт. Столы-трансформеры Summa GA ученические 40 шт. Стулья на колесах ученические 40 шт. Ноутбук HP 1 шт. Интерактивная панель NexTouch Nextpanel 86” 1 шт. Радиосистема Arthur Forty U-9700C PSC (UHF) в комплекте. Акустическая система Behringer B215D 2 шт. Веб-камера 4К с технологией искусственного интеллекта JazzTel JT-Vintage-4K 1 шт. Комплект электронных презентаций.
<i>Учебная аудитория для проведения практических занятий – Компьютерный класс</i>	Бета 4.1 – учебная аудитория для проведения практических занятий (компьютерный класс). Доска магнитно-маркерная поворотная BoardSYS Twist 100x160 ПО-15Ф 1 шт. Флипчарт 70*100 на роликах 1 шт. Стол преподавателя аудиторный 1 шт. Столы и стулья ученические 42 шт. Компьютеры Lenovo ThinkCentre M920s SFF в комплекте с мониторами IIYAMA 27” и периферией – 42 шт. Интерактивная панель NexTouch Nextpanel 86” 1 шт. Радиосистема Arthur Forty U-9700C PSC (UHF) в комплекте. Акустическая система Behringer B215D 2 шт. Веб-камера 4К с технологией искусственного интеллекта JazzTel JT-Vintage-4K 1 шт. Комплект электронных презентаций.

5.2. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе российского производства:

- пакет библиотек для Python (Anaconda);
- инструмент для сборки Haskell (Stack);
- компилятор C++ (clang).