

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

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Структурная биоинформатика и строение 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 (модуля)

1.1. Цель: формирование у студентов теоретических знаний о принципах устройства алгоритмов, применяющихся для автоматизации работы с информацией о структурах биологических макромолекул для облегчения поиска связи между их структурой и функцией, а также практических навыков использования этих алгоритмов и понимания границ их применимости.

1.2. Задачи: научиться трансформировать задачи о связи структуры и функции биомacroмолекул в представление, с которым возможно работать алгоритмически.

1.3. Общая трудоемкость: 4 з.е.

1.4. Планируемые результаты обучения:

Формируемые компетенции (код компетенции, формулировка)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю) (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-4. Способен комбинировать и адаптировать информационно-коммуникационные технологии для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии с учетом требований информационной безопасности	ИПК-4.1. Знает базовые понятия информатики, информации, ее измерения, кодирования и представления в вычислительных системах, а также принципы сбора, хранения и обработки информации
	ИПК-4.2. Использует информационно-коммуникационные технологии для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии
	ИПК-4.3. Комбинирует и адаптирует информационно-коммуникационные технологии с учетом требований информационной безопасности
ПК-6. Способен самостоятельно проводить расчетные работы и исследования в области биоинформатики, биоинженерии,	ИПК-6.1. Применяет классические методы решения задач, современные программные комплексы и навыки работы с высокотехнологичным лабораторным оборудованием для проведения расчетных работ и исследований

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Структурная биоинформатика и строение белков»	Лист 3 Листов 8
-------------------------------	---	--------------------

биотехнологии и фарминдустрии, применяя навыки работы с высокотехнологичным лабораторным оборудованием	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	2 семестр	Всего
Контактная работа обучающихся с преподавателем, всего ч.	76	76
Лекционные занятия, ч.	24	24
Практические (семинарские) занятия, ч.	48	48
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
Самостоятельная работа обучающихся, всего ч.	68	68
Общая трудоемкость, ч.	144	144
Общая трудоемкость, з.е.	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
Введение	2					2	Контрольные работы
Раздел 1. Операции с координатами, поиск соседей, KD-деревья	2	8			10	20	Контрольные работы
Раздел 2. Алгоритмические принципы работы методов восстановления протонирования в структурах	4	8			10	22	Контрольные работы

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Структурная биоинформатика и строение белков»	Лист 4 Листов 8
-------------------------------	---	--------------------

Раздел 3. Алгоритмические принципы работы программ для автоматизированного исправления ошибок в структурах	4	8			12	24	Контрольные работы
Раздел 4. Алгоритмы построения поверхностей молекул, вычисления площади поверхности, экспонированности остатков.	4	8			12	24	Контрольные работы
Раздел 5. Алгоритмы нахождения полостей в структурах, вычисления объема полостей.	4	8			12	24	Контрольные работы
Раздел 6. Принципы разметки водородных связей.	4	8			12	24	Контрольные работы
Промежуточная аттестация				4		4	Экзамен
Итого	24	48	x	4	68	144	

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

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Содержание разделов (тем) дисциплины (модуля)
Введение	Краткая история дисциплины. Общая постановка задачи оптимизации. Примеры
Раздел 1. Операции с координатами	Операции с координатами, поиск соседей, KD-деревья
Раздел 2. Алгоритмические принципы работы методов восстановления протонирования в структурах	Алгоритмические принципы работы методов восстановления протонирования в структурах
Раздел 3. Алгоритмические принципы работы программ для автоматизированного исправления ошибок в структурах	Алгоритмические принципы работы программ для автоматизированного исправления ошибок в структурах
Раздел 4. Алгоритмы построения поверхностей молекул, вычисления площади поверхности, экспонированности остатков.	Алгоритмы выделения гидрофобных ядер и структурных доменов
Раздел 5. Алгоритмы нахождения полостей в структурах, вычисления объема полостей.	Алгоритмы пространственного сопоставления и структурного выравнивания
Раздел 6. Принципы разметки водородных связей.	Алгоритмы генерации разметки вторичных структур. Возможности и успехи применения методов машинного обучения в структурной биоинформатике

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Структурная биоинформатика и строение белков»	Лист 5 Листов 8
-------------------------------	---	--------------------

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.

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
Введение	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 1. Операции с координатами, поиск соседей, KD-деревья	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 2. Алгоритмические принципы работы методов восстановления протонирования в структурах	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 3. Алгоритмические принципы работы программ для автоматизированного исправления ошибок в структурах	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 4. Алгоритмы построения поверхностей молекул, вычисления площади поверхности, экспонированности остатков.	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 5. Алгоритмы нахождения полостей в структурах, вычисления объема полостей.	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ
Раздел 6. Принципы разметки водородных связей.	Контрольные работы	Комплект заданий для контрольных работ

Примерный перечень заданий для контрольных работ:

Домашнее задание № 1

Срок выполнения домашнего задания - 3 недели. Форма представления обучающимися домашнего задания - демонстрация работоспособности кода.

Реализуйте структуру KD-деревьев на Python. Реализуйте эффективный поиск соседних атомов в структурах с помощью KD-деревьев.

Домашнее задание № 2

Срок выполнения домашнего задания - 3 недели. Форма представления обучающимися домашнего задания - демонстрация работоспособности кода.

Реализуйте алгоритм вычисления погруженности остатка.

Реализуйте алгоритм вычисления комфортности окружения остатка.

Реализуйте прототип алгоритма нахождения полости и оценки ее объема.

Домашнее задание № 3

Срок выполнения домашнего задания - 3 недели. Форма представления обучающимися домашнего задания - демонстрация работоспособности кода.

Реализуйте прототип алгоритма ДОМАК.

Реализуйте прототип алгоритма Detective.

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. KD-деревья
2. Эвристики для разметки водородных связей
3. Принципы работы Propka
4. Принципы работы Molprobit
5. Типы поверхностей, принципы построения
6. Способы вычисления площади поверхности молекулы
7. Способы вычисления объема молекулы
8. Вычисление экспонированности остатка
9. Способы нахождения полостей и вычисления их объема
10. Алгоритм DSSP
11. Алгоритм STRIDE
12. Алгоритм Swindells
13. Алгоритм CLUD
14. Алгоритм ДОМАК
15. Алгоритм Detective
16. Этапы решения задачи пространственного совмещения
17. Динамическое программирование для построения структурного выравнивания
18. Алгоритм Combinatorial Extension
19. Алгоритм Dali

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Структурная биоинформатика и строение белков»	Лист 7 Листов 8
-------------------------------	---	--------------------

20. Алгоритм SSM

21. Способы репрезентации структурной информации для применения машинного обучения в структурной биоинформатике

22. AlphaFold

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

4.1. Перечень основной литературы:

1. Алгоритмы и структуры данных: Учебник / Белов В.В., Чистякова В.И. - М.:КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 240 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

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

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

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

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

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.

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Структурная биоинформатика и строение белков»	Лист 8 Листов 8
-------------------------------	---	--------------------

	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).

Кроме того, для работы будут использованы базы данных PDB, PDB-redo, PFAM, wwPDB, а также программы Pymol, Prody, cryoSPARC, Phenix, MolProbity, WHAT_CHECK, CheckMyMetal.