

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 29.02.2024 12:22:44

Уникальный программный ключ:

ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»

Аграрно-технологический институт

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН БИО- И НАНОСТРУКТУР

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

06.05.01 БИОИНЖЕНЕРИЯ И БИОИНФОРМАТИКА

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

БИОИНЖЕНЕРИЯ И БИОИНФОРМАТИКА

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2024 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур» входит в программу специалитета «Биоинженерия и биоинформатика» по направлению 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика» и изучается в 10 семестре 5 курса. Дисциплину реализует Агробиотехнологический департамент. Дисциплина состоит из 3 разделов и 6 тем и направлена на изучение современных компьютерных методов для решения задач биоорганической химии и биотехнологии

Целью освоения дисциплины является обучение студентов умению применять компьютерные технологии для моделирования, визуализации и анализа структур биомолекул и их комплексов

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ОПК-3	Способен проводить экспериментальную работу с организмами и клетками, использовать физико-химические методы исследования макромолекул, математические методы обработки результатов биологических исследований;	ОПК-3.3 Владеет статистическими и биоинформационными методами обработки результатов биологических исследований;
ОПК-4	Способен применять методы биоинженерии и биоинформатики для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;	ОПК-4.3 Умеет применять методы биоинформатики для описания свойств биологических объектов по их геномным, транскриптомным, протеомным и метаболомным данным;
ОПК-5	Способен находить и использовать информацию, накопленную в базах данных по биологическим объектам, включая нуклеиновые кислоты и белки, владеть основными биоинформатическими средствами анализа;	ОПК-5.1 Умеет работать с базами данных по биологическим объектам; ОПК-5.2 Владеет методами автоматизации обработки экспериментальных данных;
ОПК-6	Способен разрабатывать алгоритмы и компьютерные программы, пригодные для практического применения;	ОПК-6.2 Умеет анализировать уже созданные алгоритмы и программы и создавать новые компьютерные программы в области биоинженерии и биоинженерии;
ОПК-7	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и	ОПК-7.1 Знать принципы работы современных информационных технологий и программных средств, используемых при решении задач биоинформатики и

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	использовать их для решения задач профессиональной деятельности;	биоинженерии;
ПК-1	Способен планировать, организовывать, реализовывать законченные научно-исследовательские проекты в области биоинженерии и биоинформатики	ПК-1.2 Способен использовать полученные знания и профессиональные навыки для анализа большого массива различной информации по биологическим объектам;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ОПК-3	Способен проводить экспериментальную работу с организмами и клетками, использовать физико-химические методы исследования макромолекул, математические методы обработки результатов биологических исследований;	Научно-исследовательская; Молекулярная биология; <i>Физико-химические методы в биологии**;</i> <i>Физические методы исследования макромолекул**;</i> Биохимия; Биофизика; Геномика и транскриптомика; Протеомика и метаболомика; Биостатистика; Программирование;	
ОПК-4	Способен применять методы биоинженерии и биоинформатики для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;	Сельскохозяйственная биотехнология; Иммунитет растений; Молекулярная биология; Геномика и транскриптомика; Протеомика и метаболомика; <i>Алгоритмы в биоинформатике**;</i> <i>Язык R и его применение в биоинформатике**;</i> <i>Язык программирования SQL**;</i>	
ОПК-5	Способен находить и использовать информацию, накопленную в базах	Введение в биоинформатику; Программирование;	

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	данных по биологическим объектам, включая нуклеиновые кислоты и белки, владеть основными биоинформатическими средствами анализа;		
ОПК-6	Способен разрабатывать алгоритмы и компьютерные программы, пригодные для практического применения;	Программирование; <i>Алгоритмы в биоинформатике**</i> ; <i>Язык R и его применение в биоинформатике**</i> ; <i>Язык программирования SQL**</i> ;	
ОПК-7	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности;	Программирование; <i>Алгоритмы в биоинформатике**</i> ; <i>Язык R и его применение в биоинформатике**</i> ; <i>Язык программирования SQL**</i> ; Введение в биоинформатику; Технологическая (проектно-технологическая) практика;	
ПК-1	Способен планировать, организовывать, реализовывать законченные научно-исследовательские проекты в области биоинженерии и биоинформатики	Технологическая (проектно-технологическая) практика; <i>Научное исследование: от идеи до публикации**</i> ; <i>Компьютерные технологии в научных исследованиях**</i> ; Практическая биоинформатика; Практикум по геномной инженерии; Методы редактирования генома; Генная инженерия; Математическое моделирование в биологии; Селекция; <i>Биотехнология в защите растений**</i> ; <i>Разведение продуктивных животных**</i> ; <i>Разведение продуктивных птиц**</i> ; <i>Разведение животных-компаньонов**</i> ; <i>Разведение экзотических животных и птиц**</i> ; Иммунитет растений;	

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур» составляет «2» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			10
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	36		36
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	0		0
Практические/семинарские занятия (СЗ)	36		36
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	9		9
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	27		27
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
Раздел 1	Основы компьютерного моделирования биомолекул.	1.1	Основы представления структуры биомолекул на компьютере и история визуализации молекул	СЗ
		1.2	Современные базы данных по структуре биомолекул	СЗ
Раздел 2	Особенности моделирования структуры белков	2.1	Предсказание пространственной структуры белка по аминокислотной последовательности методом сравнительного моделирования.	СЗ
		2.2	Оптимизация 3D-структуры биомолекул методом молекулярной динамики	СЗ
Раздел 3	Изучение 3D-структуры комплексов биомолекул и применение моделирования для решения задач биотехнологии	3.1	Молекулярный докинг	СЗ
		3.2	Моделирование олигомерных белковых комплексов	СЗ

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – семинарские занятия.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Семинарская	Аудитория для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Компьютерный класс для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, текущего контроля и промежуточной аттестации. Комплект специализированной мебели; технические средства (16 рабочих мест): Интерактивный комплекс - интерактивная доска Triumph Board с проектором Optoma. Виртуальный лабораторный практикум «Физикон». Программное обеспечение: продукты Microsoft (ОС, пакет офисных приложений, в т.ч. MS Office/Office 365, Teams).

<p>Для самостоятельной работы</p>	<p>Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.</p>	<p>Компьютерный класс для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, текущего контроля и промежуточной аттестации. Комплект специализированной мебели; технические средства (16 рабочих мест): Интерактивный комплекс - интерактивная доска Triumph Board с проектором Optoma. Виртуальный лабораторный практикум «Физикон». Программное обеспечение: продукты Microsoft (ОС, пакет офисных приложений, в т.ч. MS Office/Office 365, Teams).</p>
-----------------------------------	---	--

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Молекулярный докинг как метод компьютерного моделирования взаимодействия лиганда с белком : учебно-методическое пособие / Б. В. Шилов, А. Ю. Савченко, Н. С. Дубовик, А. А. Гармаш. — Москва : НИЯУ МИФИ, 2022. — 28 с. — ISBN 978-5-7262-2861-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/355556>

2. Инструкция по использованию программы Molegro Virtual Docker (MVD®) для проведения молекулярного докинга лиганд-белок : учебно-методическое пособие / С.П. Сяткин, Н.А. Шевкун, А.И. Хлебников [и др.] ; под редакцией С.П. Сяткина. - Электронные текстовые данные. - Москва : РУДН, 2021. - 25 с. : ил. URL: https://lib.rudn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=Link_FindDoc&id=501025&idb=0

Дополнительная литература:

1. Гуреев, М. А. Молекулярный докинг и его верификация в контексте виртуального скрининга : учебно-методическое пособие / М. А. Гуреев, В. В. Кадочников, Ю. Б. Порозов. — Санкт-Петербург : НИУ ИТМО, 2018. — 50 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/136513>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации

<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
- поисковая система Google <https://www.google.ru/>
- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevier.com/locate/elsevier/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Компьютерное моделирование и молекулярный дизайн био- и наноструктур» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН.