

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 22.05.2024 15:30:26

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<br>(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;<br>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<br>(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;<br>Молекулярная биология;<br><i>Физико-химические методы в биологии**</i> ;<br><i>Физические методы исследования макромолекул**</i> ;<br>Биохимия;<br>Биофизика;<br>Геномика и транскриптомика;<br>Протеомика и метаболомика;<br>Биостатистика;<br>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;<br>Иммунитет растений;<br>Молекулярная биология;<br>Геномика и транскриптомика;<br>Протеомика и метаболомика;<br><i>Алгоритмы в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык R и его применение в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык программирования SQL**</i> ;      |  |
| ОПК-5 | Способен находить и использовать информацию, накопленную в базах  | Введение в биоинформатику;<br>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;<br><i>Алгоритмы в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык R и его применение в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык программирования SQL**</i> ;  |  |
| ОПК-7 | Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности; | Программирование;<br><i>Алгоритмы в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык R и его применение в биоинформатике**</i> ;<br><i>Язык программирования SQL**</i> ;<br>Введение в биоинформатику;<br>Технологическая (проектно-технологическая) практика;  |  |
| ПК-1  | Способен планировать, организовывать, реализовывать законченные научно-исследовательские проекты в области биоинженерии и биоинформатики   | Технологическая (проектно-технологическая) практика;<br><i>Научное исследование: от идеи до публикации**</i> ;<br><i>Компьютерные технологии в научных исследованиях**</i> ;<br>Практическая биоинформатика;<br>Практикум по геномной инженерии;<br>Методы редактирования генома;<br>Генная инженерия;<br>Математическое моделирование в биологии;<br>Селекция;<br><i>Биотехнология в защите растений**</i> ;<br><i>Разведение продуктивных животных**</i> ;<br><i>Разведение продуктивных птиц**</i> ;<br><i>Разведение животных-компаньонов**</i> ;<br><i>Разведение экзотических животных и птиц**</i> ;<br>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          |
| <b>Общая трудоемкость дисциплины</b>             | <b>ак.ч.</b>   | <b>72</b> | <b>72</b>   |
|  | <b>зач.ед.</b> | <b>2</b>  | <b>2</b>    |

## 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](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](http://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.