

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным
инновациям

О.И.Чуприс

«12 июля» 2019 г.

Регистрационный № УД-4003/уч.

СТРУКТУРНАЯ БИОИНФОРМАТИКА

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 03 04 Информатика

2019 г.

Учебная программа составлена на основе образовательного стандарта высшего образования ОСВО 1-31 03 04-2013 и учебного плана УВО G31-169/уч. от 30.05.2013, G31и-192/уч. от 30.05.2013

СОСТАВИТЕЛИ:

Хадарович А.Ю. – старший преподаватель кафедры биомедицинской информатики факультета прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:


Корноушенко Ю.В. – ст. науч.сотрудник Института биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси, кандидат химических наук.

Котов В.М. – заведующий кафедрой дискретной математики и алгоритмики факультета прикладной математики и информатики БГУ, профессор, доктор физико-математических наук.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой биомедицинской информатики
(протокол № 15 от 16 мая 2019 года);

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 5 от 28 июня 2019 года).

Заведующий кафедрой
биомедицинской информатики
 Ю.Л.Орлович

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Учебная дисциплина «Структурная биоинформатика» относится к циклу дисциплин специализации для студентов, обучающихся по специальности 1-31 03 04 Информатика и является неотъемлемой частью системы подготовки специалистов в области биоинформатики. Актуальность научных исследований по этому направлению значительно возросла в последние годы в связи с повсеместным использованием компьютеров, средств обработки и хранения данных, а также широкого применения методов компьютерного моделирования как инструмента для понимания и воссоздания биологических процессов, происходящих в организме на клеточном уровне.

Цель учебной дисциплины – ознакомление с современными направлениями исследований в области структурной биоинформатики, формирование представлений о биологических процессах на структурном уровне, о методах исследования и решения задач структурной биологии при помощи компьютерного моделирования и анализа биологических данных, практическое освоение алгоритмов и программных средств моделирования структур биологических молекул.

Задачи учебной дисциплины:

1. Сформировать четкое представление о пространственной структуре биополимеров, образовании комплексов, биологических процессов, ответственных за формирование структур;

2. Развить навыки по работе с существующими базами данными, содержащими информацию о структуре биополимеров, по практическому использованию пакетов программ для моделирования белков и белковых комплексов и программ визуализации структур биологических молекул;

3. Сформировать мотивацию к самостоятельным исследованиям в области структурной биоинформатики.

Учебная дисциплина «Структурная биоинформатика» относится к циклу дисциплин специализации для студентов, обучающихся по специальности 1-31 03 04 Информатика.

Программа составлена с учетом межпредметных связей с учебными дисциплинами. Основой для изучения учебной дисциплины являются учебные дисциплины I ступени высшего образования «Методы и алгоритмы анализа данных», «Теория вероятностей и математическая статистика» и «Дискретная математика».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины 1-31 03 04 Информатика должно обеспечить формирование следующих академических, социально-личностных и профессиональных компетенций

академические компетенции:

АК-6. Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем;
АК-7. Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.

социально-личностные компетенции:

СЛК-3. Обладать способностью к межличностным коммуникациям;
СЛК-6. Уметь работать в команде.

профессиональные компетенции:

ПК-14. Работать с научной, нормативно-справочной и специальной литературой;

ПК-23. Разрабатывать новые информационные технологии на основе математического моделирования.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные задачи структурной биоинформатики, принципы современных экспериментальных методов анализа и исследования биополимеров, в первую очередь, белков;
- методы исследования пространственной структуры белков, общие принципы и области применимости этих методов
- основные виды биоинформатических сервисов для работы со структурными данными, а также алгоритмы, которые лежат в основе работы данных пакетов программ;
- наиболее распространенные методы моделирования структур биологических молекул;
- программы для просмотра и редактирования пространственных структур биомолекул

уметь:

- уметь визуализировать структуры биополимеров с помощью пакетов программ, а также производить простейшие операции над структурами в данных пакетах (Rmol);
- выбирать и правильно применять алгоритмы построения моделей как отдельных структур биологических молекул (главным образом, белков), так и комплексов, которые они образуют;
- уметь реализовывать процедуры анализа качества построенных моделей структур белковых молекул;
- применять как минимум один из существующих пакетов прикладных программ свободного доступа для докинга белковых молекул;

владеть:

- научной, технической и (частично) биомедицинской терминологией данного раздела науки и техники;

- устойчивыми навыками рационального использования методов компьютерного моделирования;
- базовыми навыками и умениями применения существующих программных средств и интернет-ресурсов для решения задач структурной биоинформатики.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 7-ом семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Структурная биоинформатика» отведено:

– для очной формы получения высшего образования – 82 часа, в том числе 52 аудиторных часа, из них: семинарских занятий – 18 часов, лабораторных работ – 30 часов, управляемой самостоятельной работы – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Введение в структурную биоинформатику

Тема 1.1. Основы организации пространственной структуры биополимеров.

Изучение общих принципов формирования пространственной структуры биополимеров, образования комплексов, биологических процессов, ответственных за формирование структур.

Тема 1.2. Основы визуализации биомолекул.

Освоение подходов визуализации структур биомолекул.

Тема 1.3. Программы для визуализации и манипулирования структурами биомолекул.

Отображение биомолекул в среде программы PyMol, Chimera; выполнение операций над структурами.

Тема 1.4. Создание и внедрение собственных функций в среды визуализации биологических молекул.

Создание скрипта в среде визуализации PyMol.

Тема 1.5. Биоинформатические ресурсы с информацией о структурах биополимеров.

Изучение основных баз данных, содержащих структурную информацию о биополимерах, поиск и извлечение заданных структур и биополимеров с заданными свойствами.

Тема 1.6. Операции над структурами молекул.

Создание скрипта для визуализации биологических молекул в PyMol.

Раздел 2. Белковая инженерия

Тема 2.1. Структурные классификации доменов.

Изучение основных классификаций доменов, анализ их различий в терминах характеристик, используемых для разделения доменов на группы.

Тема 2.2. Алгоритмы нахождения структурных доменов белков.

Реализация алгоритма поиска доменов в структурах белков.

Тема 2.3. Моделирование на основе шаблонов.

Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков на основе шаблонов, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакеты для моделирования на основе шаблонов.

Тема 2.4. Алгоритмы создания структур на основе шаблонов.

Реализация алгоритма моделирования структуры белка на основе шаблонов.

Тема 2.5. Моделирование структур de novo.

Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков de novo, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакеты для моделирования de novo.

Тема 2.6. Алгоритмы создания структур de novo.

Реализация алгоритма моделирования структуры белка de novo.

Тема 2.7. Индикаторы качества моделей структур белков.

Изучение методов оценки качества структур белков, оценка качества построенных моделей.

Тема 2.8. Обзор алгоритмов моделирования белковых структур.

Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белков, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.

Тема 2.9. Моделирование белковых структур.

Использование биоинформатического сервиса для создания модели структуры белка.

Раздел 3. Моделирование взаимодействий между биополимерами

Тема 3.1. Белок-белковые интерфейсы.

Выделение интерфейсных остатков в белок-белковых комплексах, нахождения IRMSD (Interaction root means square deviation).

Тема 3.2. Характеристики белковых интерфейсов.

Вычисление характеристик белковых интерфейсов, подсчет BSA (Buried Surface Area).

Тема 3.3. Поиск оптимального взаимного расположения структур в комплексах.

Реализация алгоритма поиска оптимального взаимного расположения структур в комплексе, подсчет RMSD (Root means square deviation).

Тема 3.4. Пластичность белков.

Сравнение структур в связанном и несвязанном состоянии, оценка изменений конформаций в различных состояниях.

Тема 3.5. Артефакты экспериментов в моделях биополимеров.

Поиск несоответствий биологических данных в базе структур PDB (ProteinDataBank), изучение различий между биологическими интерфейсами и интерфейсами, возникающими на границах кристаллографических ячеек.

Тема 3.6. Индикаторы качества моделей белковых комплексов.

Изучение методов оценки качества структур белковых комплексов, проведение оценки качества построенных моделей.

Тема 3.7. Создание искусственных структур.

Изучение методов создания структур биомолекул, не существующих в природе.

Тема 3.8. Новые подходы моделирования структур биополимеров.

Создание собственной задачи в среде для визуализации и моделирования FoldIt.

Тема 3.9. Обзор алгоритмов моделирования структур белковых комплексов.

Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белковых комплексов, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
I	Введение в структурную биоинформатику			2	8		2	
1.1	Основы организации пространственной структуры биополимеров. Изучение общих принципов формирования нативной пространственной структуры биополимеров, образования комплексов, биологических процессов, ответственных за формирование структур.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
1.2	Основы визуализации биомолекул. Освоение подходов визуализации структур биомолекул.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
1.3	Программы для визуализации и манипулирования структурами биомолекул. Отображение биомолекул в среде программы Rmol, Chimera; выполнение операций над структурами.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
1.4	Создание и внедрение собственных функций в среды визуализации биологических молекул. Создание скрипта в среде визуализации Rmol.			2				Контрольная работа
1.5	Биоинформатические ресурсы с информацией о структурах биополимеров. Изучение основных баз данных, содержащих структурную информацию о биополимерах, поиск и извлечение заданных структур и биополимеров с				2			Отчет по выполнению лабораторной работы. Выступление с докладом.

	заданными свойствами.							
1.6	Операции над структурами молекул. Создание скрипта для визуализации биологических молекул в Rmol						2	Отчет по выполнению самостоятельной работы.
II	Белковая инженерия			6	12		2	
2.1	Структурные классификации доменов. Изучение основных классификаций доменов, анализ их различий в терминах характеристик, используемых для разделения доменов на группы.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
2.2	Алгоритмы нахождения структурных доменов белков. Реализация алгоритма поиска доменов в структурах белков.			2				Устный опрос. Выступление с докладом.
2.3	Моделирование на основе шаблонов. Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков на основе шаблонов, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакеты для моделирования на основе шаблонов.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
2.4	Алгоритмы создания структур на основе шаблонов. Реализация алгоритма моделирования структуры белка на основе шаблонов.			2				Устный опрос
2.5	Моделирование структур de novo. Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков de novo, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакета для моделирования de novo.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
2.6	Алгоритмы создания структур de novo. Реализация алгоритма моделирования структуры белка de novo.			2				Устный опрос
2.7	Индикаторы качества моделей структур белков. Изучение методов оценки качества структур белков, оценка качества построенных моделей.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
2.8	Обзор алгоритмов моделирования белковых структур.				4			Отчет по выполнению

	Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белков, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.							лабораторной работы
2.9	Моделирование белковых структур. Использование биоинформатического сервиса для создания модели структуры белка.						2	Отчет по выполнению самостоятельной работы.
III	Моделирование взаимодействий между биополимерами			10	10			
3.1	Белок-белковые интерфейсы. Выделение интерфейсных остатков в белок-белковых комплексах, нахождения IRMSD (Interactionrootmeansquaredeviation).			2				Устный опрос
3.2	Характеристики белковых интерфейсов. Вычисление характеристик белковых интерфейсов, подсчет BSA (BuriedSurfaceArea).			2				Устный опрос
3.3	Поиск оптимального взаимного расположения структур в комплексах. Реализация алгоритма поиска оптимального взаимного расположения структур в комплексе, подсчет RMSD (Rootmeansquaredeviation).			2				Устный опрос
3.4	Пластичность белков. Сравнение структур в связанном и несвязанном состоянии, оценка изменений конформаций в различных состояниях.			2				Контрольная работа
3.5	Артефакты экспериментов в моделях биополимеров. Поиск несоответствий биологических данных в базе структур PDB (ProteinDataBank), изучение различий между биологическими интерфейсами и интерфейсами, возникающими на границах кристаллографических ячеек.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
3.6	Индикаторы качества моделей белковых комплексов. Изучение методов оценки качества структур				2			Отчет по выполнению лабораторной работы

	белковых комплексов, проведение оценки качества построенных моделей.							
3.7	Создание искусственных структур. Изучение методов создания структур биомолекул, не существующих в природе.				2			Отчет по выполнению лабораторной работы
3.8	Новые подходы моделирования структур биополимеров. Создание собственной задачи в среде для визуализации и моделирования FoldIt.			2				Устный опрос
3.9	Обзор алгоритмов моделирования структур белковых комплексов. Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белковых комплексов, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.				4			Отчет по выполнению лабораторной работы
				18	30		4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Введение в физику белка [Электронный ресурс] / А.В. Финкельштейн – 1999-2000. – Режим доступа: http://phys.protres.ru/lectures/protein_physics.
2. The Protein Data Bank / H. M. Berman [et al.] // Nucleic Acids Research – 2000. – Vol. 28. – P. 235–242.
3. UniProt: the Universal Protein knowledgebase / R. Apweiler [et al.] // Nucleic Acids Research – 2004. – Vol. 32. – P. D115-D119.
4. CAPRI: A Critical Assessment of PRedicted Interactions / J. Janin [et al.] // PROTEINS: Structure, Function, and Genetics – 2003. – Vol. 52. – P. 2–9.
5. Scoring Function for Automated Assessment of Protein Structure Template Quality / Y. Zhang, J. Skolnick // PROTEINS: Structure, Function, and Bioinformatics – 2002. – Vol. 57. – P. 702–710.
6. А.В. Финкельштейн. Физика белковых молекул, Издательство технической литературы «Институт компьютерных исследований» (ИКИ), ISBN: 978-5-4344-0193-7 – 424 p.
7. Лутц М. Изучаем Python, 4-е издание. – Пер. с англ. – СПб.: Символ, 2017. – 992 с.
8. Modeling protein–protein and protein–peptide complexes: CAPRI 6th edition / J. Janin [et al.] // Proteins: Struc. Funct. & Bioinformatics – 2017. – Vol. 84(3). – P. 359–377.
9. Recent Advances in Automated Protein Design and Its Future Challenges / Dani Setiawan [et al.] // Expert Opinion On Drug Discovery – 2018. – Vol. 13. – P. 587-604.

Перечень дополнительной литературы

1. Towards a detailed atlas of protein-protein interactions / Mosca, R. [et al.] // CurrOpin Struct Biol – 2013. – Vol. 23 – P. 929– 40.
2. MINT: the Molecular INTeraction database / Chatr-aryamontri, A. [et al.] // Nucleic Acids Res – 2007. – Vol. 35. – P. D572-4.
3. DIP, the Database of Interacting Proteins: a research tool for studying cellular networks of protein interactions / Xenarios, I. [et al.] // Nucleic Acids Res – 2002. – Vol. 30. – P. 303-5.
4. The MIntAct project – IntAct as a common curation platform for 11 molecular interaction databases / Orchard, S. [et al.] // Nucleic Acids Res – 2014. – Vol. 42. – P. D358-63.
5. Templates are available to model nearly all complexes of structurally characterized proteins / Kundrotas, P.J. [et al.] // Proc Natl Acad Sci USA – 2012. – Vol. 109. – P. 9438-41.
6. Towards a detailed atlas of protein-protein interactions / Mosca, R. [et al.] // CurrOpin Struct Biol – 2013. – Vol. 23 – P. 929– 40.
7. Леск А. Введение в биоинформатику – Бином. Лабораториязнаний, 2015. – 318 с.

8. The MIntAct project – IntAct as a common curation platform for 11 molecular interaction databases / Orchard, S. [et al.] // Nucleic Acids Res – 2014. – Vol. 42. – P. D358-63.

9. Artificial Intelligence in Drug Design. / Hessler G, Baringhaus K. [et al.] // Molecules – 2018. – Vol. 23. – P. 2520.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой оценки

Для диагностики компетенций в рамках учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы:

1. Устная форма: выборочный устный опрос.
2. Письменная форма: контрольные работы, отчеты по лабораторным работам.

При формировании итоговой оценки используется рейтинговая оценка знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая оценка предусматривает использование весовых коэффициентов для текущего контроля знаний студентов по дисциплине.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущего контроля знаний в рейтинговую оценку:

- работа на семинарских занятиях – 40%;
- лабораторные работы – 40 %;
- самостоятельные работы – 20%.

Формой текущей аттестации по дисциплине «Структурная биоинформатика» учебным планом предусмотрен зачет.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

1. Тема 1.6.«Операции над структурами молекул. Создание скрипта для визуализации биологических молекул в Rmol». Требуется создать скрипт для визуализации биологических молекул в среде Rmol.

Форма контроля - отчет по выполнению самостоятельной работы.

2. Тема 2.9.«Моделирование белковых структур. Использование биоинформатического сервиса для создания модели структуры белка». Требуется написать функцию для вычисления схожести структур в различных конформациях.

Форма контроля - отчет по выполнению самостоятельной работы.

Примерная тематика лабораторных занятий

Лабораторная работа №1

Основы организации пространственной структуры биополимеров.

Изучение общих принципов формирования нативной пространственной структуры биополимеров, образования комплексов, биологических процессов, ответственных за формирование структур

Лабораторная работа №2

Основы визуализации биомолекул.

Освоение подходов визуализации структур биомолекул.

Лабораторная работа №3

Программы для визуализации и манипулирования структурами биомолекул.

Отображение биомолекул в среде программы PyMol, Chimera; выполнение операций над структурами.

Лабораторная работа №4

Биоинформатические ресурсы с информацией о структурах биополимеров.

Изучение основных баз данных, содержащих структурную информацию о биополимерах, поиск и извлечение заданных структур и биополимеров с заданными свойствами.

Лабораторная работа №5

Структурные классификации доменов.

Изучение основных классификаций доменов, анализ их различий в терминах характеристик, используемых для разделения доменов на группы.

Лабораторная работа №6

Моделирование на основе шаблонов.

Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков на основе шаблонов, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакеты для моделирования на основе шаблонов.

Лабораторная работа №7

Моделирование структур de novo.

Изучение основных алгоритмов создания моделей структур белков de novo, анализ алгоритмов, на основе которых работают пакеты для моделирования de novo.

Лабораторная работа №8

Индикаторы качества моделей структур белков. Изучение методов оценки качества структур белков, оценка качества построенных моделей.

Лабораторная работа №9

Обзор алгоритмов моделирования белковых структур.

Лабораторная работа №10

Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белков, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.

Лабораторная работа №11

Артефакты экспериментов в моделях биополимеров.

Поиск несоответствий биологических данных в базе структур PDB (ProteinDataBank), изучение различий между биологическими интерфейсами и интерфейсами, возникающими на границах кристаллографических ячеек.

Лабораторная работа №12

Индикаторы качества моделей белковых комплексов.

Изучение методов оценки качества структур белковых комплексов, проведение оценки качества построенных моделей.

Лабораторная работа №13

Создание искусственных структур.

Изучение методов создания структур биомолекул, не существующих в природе.

Лабораторная работа №14

Обзор алгоритмов моделирования структур белковых комплексов.

Лабораторная работа №15

Обзор научных публикаций, посвященных алгоритмам моделирования структур белковых комплексов, выступление с докладом и обсуждение результатов, изложенных в статьях.

Примерная тематика семинарских занятий

Семинар № 1.

Создание и внедрение собственных функций в среды визуализации биологических молекул. Создание скрипта в среде визуализации Rmol.

Семинар № 2.

Алгоритмы нахождения структурных доменов белков. Реализация алгоритма поиска доменов в структурах белков.

Семинар № 3.

Алгоритмы создания структур на основе шаблонов. Реализация алгоритма моделирования структуры белка на основе шаблонов.

Семинар № 4.

Алгоритмы создания структур denovo. Реализация алгоритма моделирования структуры белка denovo.

Семинар № 5.

Белок-белковые интерфейсы. Выделение интерфейсных остатков в белок-белковых комплексах, нахождения IRMSD (Interactionrootmeansquaredeviation).

Семинар № 6.

Характеристики белковых интерфейсов. Вычисление характеристик белковых интерфейсов, подсчет BSA (BuriedSurfaceArea).

Семинар № 7.

Поиск оптимального взаимного расположения структур в комплексах.

Реализация алгоритма поиска оптимального взаимного расположения структур в комплексе, подсчет RMSD (Rootmeansquaredeviation).

Семинар № 8.

Пластичность белков. Сравнение структур в связанном и несвязанном состоянии, оценка изменений конформаций в различных состояниях.

Семинар № 9.

Новые подходы моделирования структур биополимеров. Создание собственной задачи в среде для визуализации и моделирования FoldIt.

Рекомендуемая тематика контрольных работ

1. Контрольная работа № 1. Создание и внедрение собственных функций в среде визуализации биологических молекул.
2. Контрольная работа № 2. Пластичность белков. Сравнение структур в связанном и несвязанном состоянии, оценка изменений конформаций в различных состояниях.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины(эвристический, проективный, практико-ориентированный)

При организации образовательного процесса большинства практических занятий используется практико-ориентированный подход, который предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности.

Также при организации образовательного процесса используются методы группового обучения, проектного обучения и учебной дискуссии. Занятия включают обсуждение домашних заданий в форме проекта в группах до 3-5 человек в форме мозгового штурма. Выполнение проекта предусматривает самостоятельную работу с научными и техническими источниками по теме курса, самостоятельный поиск и выбор способа решения задачи. Предусмотрено выступление с докладами по прочитанным научным статьям (устная защита домашнего проекта с критическим анализом идей).

Комбинация методов предполагает

- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;

- способ организации учебной деятельности студентов, развивающий актуальные для учебной и профессиональной деятельности навыки планирования, самоорганизации, сотрудничества и предполагающий создание собственного продукта;

- приобретение навыков для решения исследовательских, творческих, социальных, предпринимательских и коммуникационных задач.

- появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся, кроме подготовки к экзамену, подготовка к зачету

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине следует использовать современные информационные технологии: разместить в сетевом доступе комплекс учебных и учебно-методических материалов (учебно-программные материалы, презентации лекций, методические указания к практическим занятиям, электронные версии домашних заданий, материалы текущего контроля и текущей аттестации, позволяющие определить соответствие учебной деятельности обучающихся требованиям образовательных стандартов высшего образования и учебно-программной документации, в том числе вопросы для подготовки к зачёту, задания, вопросы для самоконтроля, список рекомендуемой литературы, информационных ресурсов и др.).

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Какие методы существуют для предсказания вторичной структуры белка?
2. Что такое моделирование по гомологии?
3. Объяснить термин «молекулярная динамика».
4. Какие методы существуют для предсказания третичной структуры белка?
5. Что такое докинг? Какие алгоритмы применяются для докинга белковых молекул?
6. Какие базы данных содержат информацию о биополимерах?
7. Перечислить основные классификации доменов белков.
8. Что такое белковый интерфейс? Перечислить основные характеристики белковых интерфейсов.
9. Перечислить индикаторы качества моделей белковых структур.
10. Чем гибкий докинг отличается от жёсткого? Перечислить сервисы докинга белковых молекул.
11. Структурное выравнивание двух белков в среде визуализации PyMol или Chimera.
12. Поиск белков в базе данных PDB с заданными параметрами: разрешение структуры не менее 2.5 Å, экспериментальный метод определения структуры – рентгеновская кристаллография.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Основы компьютерного моделирования биомолекул	Кафедра биомедицинской информатики	Нет	Изменений в содержании учебной программы не требуется, протокол № 15 от 16 мая 2019 г.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 201_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
