

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»**

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИБСиБ
_____ А.В. Васин
«30» мая 2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Компьютерная метаболомика»

Разработчик	Высшая школа биомедицинских систем и технологий
Направление (специальность) подготовки	06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика
Наименование ООП	06.05.01_01 Биоинженерия и биоинформатика
Квалификация (степень) выпускника	биоинженер и биоинформатик
Образовательный стандарт	СУОС
Форма обучения	Очная

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП
_____ Д.И. Богомаз
«15» апреля 2025 г.

Соответствует СУОС
Утверждена протоколом заседания
высшей школы "ВШБСиТ"
от «15» апреля 2025 г. № 6

РПД разработал:
Доцент, к.б.н. Д.И. Богомаз

1. Цели и планируемые результаты изучения дисциплины

Цели освоения дисциплины

Изучение дисциплины "Компьютерная метаболомика" направлено на формирование современных представлений о предмете и основных концепциях компьютерной метаболомики, задачах вычислительной метаболомики, возможностях приложения компьютерной метаболомики подходов к решению фундаментальных и прикладных проблем молекулярной биологии, молекулярной генетики, клеточной биологии, биомедицины, фармакологии. посредством инструментов компьютерной метаболомики.

Результаты обучения выпускника

Код	Результат обучения (компетенция) выпускника ООП
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
ИД-10 ОПК-4	Применяет методы машинного обучения для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
ИД-1 ОПК-4	Применяет методы алгоритмизации для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
ИД-9 ОПК-4	Применяет методы практической 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-6	Способен создавать компьютерные программы, используемые в биоинформатике и биоинженерии
ИД-2 ОПК-6	Создает и дополняет компьютерные программы в среде Матлаб, используемые в биоинформатике и биоинженерии.

Планируемые результаты изучения дисциплины

знания:

- Знает методы алгоритмизации для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
- Знание методов практической 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;
- Знание методов машинного обучения для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
- Знание способов создания и дополнения компьютерных программы в среде Матлаб, используемые в биоинформатике и биоинженерии.

умения:

- Умеет применять методы алгоритмизации для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
- Умение применять методы практической 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;
- Умение применять методы машинного обучения для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
- Умение создавать и дополнять компьютерные программы в среде Матлаб, используемые в биоинформатике и биоинженерии.

навыки:

- Владеет методами алгоритмизации для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ

результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;

- Владение методами практической 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;
- Владение методами машинного обучения для получения новых знаний и для получения биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, проводить анализ результатов и методического опыта исследования, определять практическую значимость исследования;
- Владение навыками создания и дополнения компьютерных программ в среде Матлаб, используемые в биоинформатике и биоинженерии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

В учебном плане дисциплина «Компьютерная метаболомика» относится к модулю «Модуль цифровых компетенций (Digital)».

Изучение дисциплины базируется на результатах освоения следующих дисциплин:

- Вычислительная химия
- Вычислительная математика

3. Распределение трудоёмкости освоения дисциплины по видам учебной работы и формы текущего контроля и промежуточной аттестации

3.1. Виды учебной работы

Виды учебной работы	Трудоёмкость по семестрам
	Очная форма
Лекционные занятия	30
Практические занятия	14
Самостоятельная работа	55
Часы на контроль	5
Промежуточная аттестация (зачет)	4
Общая трудоёмкость освоения дисциплины	108, ач
	3, зет

3.2. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации	Количество по семестрам
	Очная форма
Промежуточная аттестация	
Зачеты, шт.	1

4. Содержание и результаты обучения

4.1 Разделы дисциплины и виды учебной работы

№ раздела	Разделы дисциплины, мероприятия текущего контроля	Очная форма		
		Лек, ач	Пр, ач	СР, ач
1.	Введение в компьютерную метабомику	3	0	2
2.	Базы данных метабомики	3	2	4
3.	Моделирование метаболических сетей	4	2	4

4.	Автоматическое аннотирование результатов исследований метаболомных сетей.	4	2	5
5.	Компьютерная эволюция метаболических путей.	4	2	10
6.	Автоматизированные способы получения метаболомных данных.	4	2	10
7.	Методы вычислительной метаболомики	4	2	10
8.	Биоинформационная поддержка эксперимента	4	2	10
Итого по видам учебной работы:		30	14	55
Зачеты, ач				5
Часы на контроль, ач				5
Промежуточная аттестация (зачет)		4		
Общая трудоёмкость освоения: ач / зет		108 / 3		

4.2. Содержание разделов и результаты изучения дисциплины

Раздел дисциплины	Содержание
1. Введение в компьютерную метаболомику	История развития биоинформационных методов. Основные задачи и методы биоинформатики в исследовании генома и протеома
2. Базы данных метаболомики	Основы структур баз данных (записи, поля, объекты) классификация баз по способу заполнения (автоматические, архивные, курируемые) основные базы данных: GenBank, EMBL SwissProt, TrEMBL, PIR PDB базы, содержащие результаты глобальных экспериментов по анализу метаболомных данных, банки белковых семейств (SCOP, Prosite, ProDom, PFAM, InterPro) метаболитические базы данных генетические банки (физические карты, OMIM) специализированные банки данных конкретные белковые семейства, РНК и т.д. конкретные геномы функциональные сайты в белках и ДНК
3. Моделирование метаболомных сетей	Сравнение последовательностей выравнивание двух последовательностей глобальное и локальное выравнивание, вес выравнивания, матрицы аминокислотных замен дот-матрицы глобальное выравнивание: алгоритм Нидельмана-Вунша локальное выравнивание: алгоритм Смита-Ватермана другие алгоритмы локального выравнивания другие варианты выравнивания (fitting, overlaps, блочное выравнивание, сплайсированное выравнивание) статистическая значимость выравниваний и ее зависимость от вероятностной модели последовательности (в т.ч. сегменты малой сложности) зависимость выравнивания от параметров множественное выравнивание динамическое программирование последовательное выравнивание (Clustal) другие алгоритмы множественного выравнивания (DIALIGN, Match-Box, алгоритм Леонтовича-Бродского) профили, скрытые марковские модели поиск блоков (максимизация ожидания, Gibbs sampler, имитация теплового отжига и т.д.)
4. Автоматическое аннотирование результатов исследований метаболомных сетей.	Поиск гомологов в базах данных, интерпретация результатов, сравнение алгоритмов, зависимость от параметров (матрицы, фильтры и т.п.)

5. Компьютерная эволюция метаболических путей.	Эволюция молекул и организмов, ортологи и паралоги, горизонтальный перенос, деревья видов и деревья генов Филогенетическое дерево как математический объект Модели эволюции алгоритмы построения филогенетических деревьев, матрица расстояний методы, основанные на матрице расстояний (UPGMA, neighbour-joining, minimal evolution, топологические инварианты и др.), другие методы (максимальная экономия, максимальное правдоподобие) алгоритмические проблемы поиска оптимального дерева, bootstrapping, согласование деревьев Эволюция на уровне генома (синтения, хромосомные перестройки)
6. Автоматизированные способы получения метаболомных данных.	Нуклеотидный состав (изохоры, GC-острова, картирование старта репликации) частые и редкие слова (вероятностные проблемы) статистика ДНК как характеристика генома
7. Методы вычислительной метаболомики	Метаболическая реконструкция (в т.ч. неортологичные замещения), позиционный анализ, эволюция регуляторных взаимодействий, эволюция белковых семейств, их доля в геноме
8. Биоинформационная поддержка эксперимента	Подбор праймеров для ПЦР Анализ данных двумерного фореа (обработка изображений), масс-спектрометрия белков Анализ данных по экспрессии генов (microarrays и др.), обработка изображений, кластеризация профилей экспрессии, диагностика по экспрессии генов

5. Образовательные технологии

При освоении дисциплины предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. В курсе запланирована активная работа студентов в компьютерном классе с доступом в Интернет для работы с биоинформационными банками данных, на биоинформационных порталах с программным инструментарием извлечения информации и ее анализа. Студенты на примерах конкретных исследовательских задач геномики и протеомики разбирают применение вычислительных методов, отрабатывают навыки применения компьютерных методов в биологии.

6. Лабораторный практикум

Не предусмотрено

7. Практические занятия

№ раздела	Наименование практических занятий (семинаров)	Трудоемкость, ач
		Очная форма
1.	Базы данных метаболомики	2
2.	Моделирование метаболомных сетей	2
3.	Автоматическое аннотирование результатов исследований метаболомных сетей.	2
4.	Компьютерная эволюция метаболических путей.	2
5.	Автоматизированные способы получения метаболомных данных.	2
6.	Методы вычислительной метаболомики	2
7.	Биоинформационная поддержка эксперимента	2
Итого часов		14

8. Организация и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Примерное распределение времени самостоятельной работы студентов

Вид самостоятельной работы	Примерная трудоемкость, ач
	Очная форма
Текущая СР	
работа с лекционным материалом, с учебной литературой	2
опережающая самостоятельная работа (изучение нового материала до его изложения на занятиях)	4
самостоятельное изучение разделов дисциплины	4
выполнение домашних заданий, домашних контрольных работ	6
подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям	5
подготовка к контрольным работам, коллоквиумам	4
Итого текущей СР:	25
Творческая проблемно-ориентированная СР	
выполнение расчётно-графических работ	0
выполнение курсового проекта или курсовой работы	0
поиск, изучение и презентация информации по заданной проблеме, анализ научных публикаций по заданной теме	15
работа над междисциплинарным проектом	0
исследовательская работа, участие в конференциях, семинарах, олимпиадах	0
анализ данных по заданной теме, выполнение расчётов, составление схем и моделей на основе собранных данных	15
Итого творческой СР:	30
Общая трудоемкость СР:	55

9. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

9.1. Адрес сайта курса

<https://dl-ibmst.spbstu.ru/>

9.2. Рекомендуемая литература

Основная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Осенняя Д.И., Дробинцев П.Д. Адаптация инструмента поиска мутаций в геноме для технологии Spark, 2016. URL: http://elib.spbstu.ru/dl/2/v16-2299.pdf	2016	ЭБ СПбПУ

Дополнительная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Власьев И.М. Разработка веб-сервиса анализа и визуализации геномных данных, 2015. URL: http://elib.spbstu.ru/dl/2/8594.pdf	2015	ЭБ СПбПУ

Ресурсы Интернета

1. <https://www.bioinformatics.org/>: <https://www.bioinformatics.org/>

9.3. Технические средства обеспечения дисциплины

Освоение дисциплины "Вычислительная геномика и протеомика" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов, Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Для проведения занятий необходима мультимедийная аудитория и компьютерный класс с выходом в Интернет.

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Освоение дисциплины "Вычислительная геномика и протеомика" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов, Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Для проведения занятий необходима мультимедийная аудитория и компьютерный класс с выходом в Интернет.

11. Критерии оценивания и оценочные средства

11.1. Критерии оценивания

Для дисциплины «Компьютерная метаболомика» формой аттестации является зачёт. Оценивание качества освоения дисциплины производится с использованием рейтинговой системы.

Зачёт

Для получения зачёта необходимо набрать минимум 50 баллов из 100.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

11.2. Оценочные средства

Оценочные средства по дисциплине представлены в фонде оценочных средств, который является резервной частью основной образовательной программы и размещается в электронной информационно-образовательной среде СПбПУ на портале etk.spbstu.ru

12. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Дисциплина, прежде всего, подразумевает наряду с теоретическими знаниями формирование у студентов устойчивых практических навыков. Преподаватель должен ориентировать студентов на полное решение практических задач, которые возникают у биоинформатика-практика, от сборки геномов, до анализа клинически значимых SNP.

Целью курса не является создание и разработка новых алгоритмов или построения теоретической биоинформатики, однако в практических реализациях "простых" биоинформатических задач, курс должен быть самодостаточным.

Курс строится на знаниях, полученных студентами на дисциплинах, как биологического, так и биоинформатического профиля. В ходе прохождения курса необходимо акцентировать внимание студентов на знания и сведения, из смежных дисциплин.

В ходе курса требуется проводить контроль текущей успеваемости, проводить контрольные и проверочные работы, коллоквиумы по наиболее сложным темам, однако не надо забывать, что главной целью этого курса является формирование целостных навыков работы в системе биологические данные-ПО- база последовательностей для получения принципиально новых данных.

13. Адаптация рабочей программы для лиц с ОВЗ

Адаптированная программа разрабатывается при наличии заявления со стороны обучающегося (родителей, законных представителей) и медицинских показаний (рекомендациями психолого-медико-педагогической комиссии). Для инвалидов адаптированная образовательная программа разрабатывается в соответствии с индивидуальной программой реабилитации.