

**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)

«Программные средства биоинформатики на Matlab»

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.ф.-м.н. Е.А. Скребенков

1. Цели и планируемые результаты изучения дисциплины

Цели освоения дисциплины

1. Сформировать у обучающегося представление о современных методах структурной биоинформатики и их применении в биологии и медицине.
2. Сформировать понимание основных принципов предсказания, анализа и визуализации пространственной структуры биологических макромолекул.
3. Уметь применять полученные знания для решения задач, связанных с анализом структуры и функции белков, ДНК и РНК.

Результаты обучения выпускника

Код	Результат обучения (компетенция) выпускника ООП
ПК-1	Способен разрабатывать новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, в том числе больших данных
ИД-3 ПК-1	Разрабатывает новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, при управлении базами данных

Планируемые результаты изучения дисциплины

знания:

- Знание новых алгоритмов обработки цифровой биологической информации, при управлении базами данных

умения:

- Умение разрабатывать новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, при управлении базами данных

навыки:

- Владение методами разработки новых алгоритмов обработки цифровой биологической информации, при управлении базами данных.

2. Место дисциплины в структуре ООП

В учебном плане дисциплина «Программные средства биоинформатики на Matlab» относится к модулю «Модуль цифровых компетенций (Digital)».

Изучение дисциплины базируется на результатах освоения следующих дисциплин:

- Высшая математика
- Вычислительная математика
- Физика
- Основы молекулярной биологии
- Программирование Python

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

3.1. Виды учебной работы

Виды учебной работы	Трудовое время по семестрам
	Очная форма
Лекционные занятия	30
Лабораторные занятия	30
Самостоятельная работа	74
Часы на контроль	2
Промежуточная аттестация (зачет с оценкой)	8
Общая трудоёмкость освоения дисциплины	144, ач
	4, зет

3.2. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации	Количество по семестрам
	Очная форма
Промежуточная аттестация	
Зачеты с оценкой, 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	Лаб, ач	СР, ач
1.	Введение в структурную биоинформатику.			
1.1.	Предмет и задачи структурной биоинформатики.	2	0	1
1.2.	Базы данных структурной биоинформатики.	2	2	6
2.	Предсказание вторичной структуры белка.			

2.1.	Предсказание вторичной структуры белка.	4	0	6
2.2.	Оценка качества предсказания вторичной структуры.	2	2	6
3.	Моделирование пространственной структуры белка.			
3.1.	Методы моделирования пространственной структуры белка.	2	2	5
3.2.	Инструменты моделирования пространственной структуры белка.	2	4	8
4.	Молекулярная динамика в структурной биоинформатике.			
4.1.	Введение в молекулярную динамику.	4	2	8
4.2.	Инструменты молекулярной динамики.	2	8	8
5.	Анализ структуры и функции белков.	4	4	9
6.	Молекулярный докинг.	4	4	9
7.	Структура и функции ДНК и РНК.	2	2	8
Итого по видам учебной работы:		30	30	74
Зачеты с оценкой, ач				2
Часы на контроль, ач				2
Промежуточная аттестация (зачет с оценкой)		8		
Общая трудоёмкость освоения: ач / зет		144 / 4		

4.2. Содержание разделов и результаты изучения дисциплины

Раздел дисциплины	Содержание
1. Введение в структурную биоинформатику.	
1.1. Предмет и задачи структурной биоинформатики.	Роль структурной информации в понимании функций биомолекул. Краткий обзор основных экспериментальных методов определения структуры биомолекул (рентгеновская кристаллография, ЯМР, криоэлектронная микроскопия).
1.2. Базы данных структурной биоинформатики.	Базы данных: protein data bank (PDB), UniProt, SCOP, CATH. Форматы хранения данных о структуре биомолекул (PDB, mmCIF).
2. Предсказание вторичной структуры белка.	
2.1. Предсказание вторичной структуры белка.	Вторичная структура белка: α -спирали, β -листы, петли. Методы предсказания вторичной структуры белка: статистические методы, методы, основанные на машинном обучении.
2.2. Оценка качества предсказания вторичной структуры.	Оценка качества предсказания вторичной структуры. Факторы, влияющие на точность предсказания. Инструменты предсказания и оценки точности вторичной структуры белка.
3. Моделирование пространственной структуры белка.	
3.1. Методы моделирования пространственной структуры белка.	Методы моделирования пространственной структуры белка: гомологичное моделирование, построение модели "с нуля" (нейросетевые подходы, ab initio подходы).
3.2. Инструменты моделирования пространственной структуры белка.	Программное обеспечение для моделирования пространственной структуры белка: Modeller, Rosetta, Swiss-Model, AlphaFold. Оценка качества моделей.
4. Молекулярная динамика в структурной биоинформатике.	
4.1. Введение в молекулярную динамику.	Введение в молекулярную динамику. Силовые поля, используемые для моделирования биомолекул. Основные алгоритмы молекулярной динамики.
4.2. Инструменты молекулярной динамики.	Программные пакеты для молекулярной динамики: GROMACS, NAMD, Amber. Подготовка систем к симуляции молекулярной динамики.
5. Анализ структуры и функции белков.	Связь структуры и функции белка. Анализ активного центра фермента. Предсказание сайтов связывания лигандов.

6. Молекулярный докинг.	Молекулярный докинг. Методы и программное обеспечение для молекулярного докинга. Применение молекулярного докинга в разработке лекарственных препаратов.
7. Структура и функции ДНК и РНК.	Структурные особенности ДНК и РНК. Вторичная структура РНК. Моделирование молекулярной динамики нуклеиновых кислот.

5. Образовательные технологии

1. Интерактивная лекция. Теоретический материал преподносится на примере блоков кода, который обучающийся может изменять и запускать.
2. Лабораторные работы: современные подходы и инструменты.
3. Исследовательские мини-проекты. Постановка научной задачи, получение результата, составление отчёта.

6. Лабораторный практикум

№ раздела	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, ач
		Очная форма
1.	Поиск и анализ информации о структуре белков в базах данных PDB и UniProt.	2
2.	Предсказание вторичной структуры белка с использованием онлайн-сервисов и программных пакетов. Оценка качества полученных результатов.	2
3.	Построение модели пространственной структуры белка методом гомологичного моделирования.	4
4.	Оценка качества построенной модели.	2
5.	Визуализация траекторий молекулярной динамики. Анализ стабильности белковой структуры.	6
6.	Исследование конформационных изменений белка методом молекулярной динамики.	4
7.	Поиск и анализ активного центра фермента.	4
8.	Проведение молекулярного докинга лиганда к белку.	4
9.	Предсказание вторичной структуры РНК.	2
Итого часов		30

7. Практические занятия

Не предусмотрено

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	18
опережающая самостоятельная работа (изучение нового материала до его изложения на занятиях)	0
самостоятельное изучение разделов дисциплины	20
выполнение домашних заданий, домашних контрольных работ	0
подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям	19
подготовка к контрольным работам, коллоквиумам	17
Итого текущей СР:	74
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	0
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	0
Итого творческой СР:	0
Общая трудоемкость СР:	74

9. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

9.1. Адрес сайта курса

<https://dl-ibmst.spbstu.ru/course/view.php?id=2871>

9.2. Рекомендуемая литература

Основная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Baldi P., Brunak S. Bioinformatics: Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 2001. URL: https://ieeexplore.ieee.org/xpl/bkabstractplus.jsp?bkn=6267217	2001	ЭБ СПбПУ

Ресурсы Интернета

1. gromacs официальная документация: <https://manual.gromacs.org/current/index.html>

9.3. Технические средства обеспечения дисциплины

1. Microsoft:

WorkStation + Office Pro Plus

Office 365 ProPlus Enrollment ID: 58313261

Parent Program: 75434048

Сублицензионный договор с ООО «СОФТЛАЙН ПРОЕКТЫ» от 23.10.2017 № 180/17-Д

2. Программа «Защита образования» компании «Лаборатория Касперского» Соглашение № 1CE0151102071341

Договор на оказание услуг по продлению техподдержки бессрочных академических лицензий с ООО «ПОЛИКОМ ПРО» от 23.10.2017 № 182/17-Д

3. Программное обеспечение «Антиплагиат.ВУЗ» Лицензионный договор с ЗАО «Анти-Плагат» от 26.03.2018 № 170

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Microsoft:

WorkStation + Office Pro Plus

Office 365 ProPlus Enrollment ID: 58313261

Parent Program: 75434048

Сублицензионный договор с ООО «СОФТЛАЙН ПРОЕКТЫ» от 23.10.2017 № 180/17-Д

2.Программа «Защита образования» компании «Лаборатория Касперского» Соглашение № 1CE0151102071341

Договор на оказание услуг по продлению техподдержки бессрочных академических лицензий с ООО «ПОЛИКОМ ПРО» от 23.10.2017 № 182/17-Д

3.Программное обеспечение «Антиплагиат.ВУЗ» Лицензионный договор с ЗАО «Анти-Плагат» от 26.03.2018 № 170

11. Критерии оценивания и оценочные средства

11.1. Критерии оценивания

Для дисциплины «Программные средства биоинформатики на Mathlab» формой аттестации является зачёт с оценкой. Оценивание качества освоения дисциплины производится с использованием рейтинговой системы.

оценка "неудовлетворительно" выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено частично, необходимые практические навыки работы не сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнено, либо качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному; при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий.

оценка "удовлетворительно" выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнены, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки;

оценка "хорошо" выставляется студенту, если теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками;

оценка "отлично" выставляется студенту, если теоретическое содержание дисциплины освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному;

11.2. Оценочные средства

Оценивается правильность решения поставленных задач для самостоятельной работы. Оценивается насколько полно и успешно обучающийся может применять полученные на занятиях навыки для решения учебных проблем и задач. Оценивается способность студента определить общее направление решения поставленной задачи и реализация частных шагов.

Оценка производится путём анализа преподавателем сданных в течение семестра работ работ. Оценке подвергается самостоятельная работа во время аудиторных занятий и при выполнении самостоятельной работы.

Примеры заданий:

Вам предоставлена аминокислотная последовательность нового белка, функция которого неизвестна. Опишите поэтапный план исследования этого белка с помощью инструментов структурной биоинформатики и молекулярной динамики для того, чтобы:

1. Предсказать его пространственную структуру. Какие методы Вы будете использовать и почему? Какие ограничения и сложности могут возникнуть на этом этапе?
2. Оценить качество полученной модели. Какие критерии оценки качества модели Вы знаете?
3. Предложить гипотезу о функции белка, основываясь на его структурных особенностях. Какие инструменты биоинформатики помогут Вам в этом?
4. С помощью молекулярной динамики исследовать динамику и стабильность белка, а также его взаимодействие с потенциальным лигандом. Какие параметры и свойства системы Вы будете анализировать?

Обоснуйте свой выбор методов и инструментов на каждом этапе.

Оценка:

- * Полнота и корректность описания каждого этапа исследования.
- * Обоснованность выбора методов и инструментов.
- * Понимание ограничений и сложностей, связанных с каждым этапом.
- * Способность связать структурную информацию с функцией белка.

12. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Программа курса "Структурная биоинформатика" нацелена на ознакомление студентов с фундаментальными принципами и современными вычислительными методами, применяемыми для анализа структуры и функции биологических макромолекул. Помимо освоения теоретических основ, особое внимание уделяется практическому применению полученных знаний для решения актуальных задач в области биологии и медицины.

Ключевую роль в процессе обучения играет самостоятельная работа студентов. В рамках курса им предлагается решать разнообразные учебные задачи, основанные на реальных проблемах структурной биоинформатики, таких как: предсказание пространственной структуры белков, исследование взаимодействия молекул, анализ данных молекулярной динамики.

Значительное внимание уделяется практическим навыкам обработки экспериментальных данных, их визуализации и интерпретации, а также применению программирования для моделирования биологических процессов на молекулярном уровне.

Преподаватель закладывает фундамент знаний по каждой теме, знакомит студентов с основными алгоритмами и программными инструментами. В дальнейшем, он выступает в роли наставника, направляя студентов в процессе решения комплексных задач, помогая им находить оптимальные пути и поощряя самостоятельное изучение специализированной

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.