

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор института нано-, био-,
информационных, когнитивных
и социогуманитарных наук и
технологий**

Т.Е. Григорьев

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине:	Основы структурной биоинформатики и молекулярного моделирования
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Природоподобные технологии и биомиметический дизайн материалов и систем Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра нано-, био-, информационных и когнитивных технологий
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: А.В. Швецов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры нано-, био-, информационных и когнитивных технологий
18.03.2022

Аннотация

В последние годы широкое распространение получили методы компьютерного моделирования в исследовании различных биологических систем. Отчасти это произошло из-за бурного прогресса в современной вычислительной техники, но так же немаловажную роль сыграло развитие различных теоретических методов исследования биологических систем, а так же их стыковка с экспериментальными данными. Данный курс направлен на освоение современных методов структурной биоинформатики и молекулярного моделирования.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- освоение студентами базовых представлений о структурной биоинформатике и молекулярном моделировании, а так же вариантов их практического применения.

Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний структурной биоинформатике и её практическом применении;
- формирование базовых знаний молекулярном моделировании и его практическом применении.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.2 Владеет навыком руководства малым коллективом в сфере своей профессиональной деятельности
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- фундаментальные понятия, законы, теории и формулы, описывающие поведения макромолекул;
- основные законы по которым строятся взаимодействия внутри биомacroмолекулярных систем;
- теоретические основы молекулярного моделирования.

уметь:

- анализировать биомacroмолекулярные структуры;
- применять современные методики молекулярного моделирования;
- применять современные методы молекулярной реконструкции биомолекул;
- эффективно использовать современные информационные технологии и ресурсы для получения необходимых знаний по интересующей научной проблеме.

владеть:

- специальной терминологией в области структурной биоинформатики и молекулярного моделирования;
- методиками построения молекулярных моделей;
- основными методиками молекулярной динамики;
- основными методами и подходами совместного анализа экспериментальных данных и данных молекулярного моделирования.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Структура биомакромолекул.	5			10
2	Структурная биоинформатика.	10			10
3	Молекулярное моделирование и молекулярная динамика.	5			10
4	Расчёты энергий взаимодействия.	5			15
5	Анализ данных молекулярного моделирования.	5			15
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Структура биомакромолекул.

Понятие о структуре биомакромолекул. Основные элементы биомакромолекулярных структур. Основные экспериментальные методы получения информации о структуре биомакромолекул.

2. Структурная биоинформатика.

Структурная биоинформатика. Основные понятия. Гомологическое моделирование. Методы построения структур биомакромолекул.

3. Молекулярное моделирование и молекулярная динамика.

Молекулярное моделирование. Потенциальные функции и молекулярные поля. Принципы построения молекулярных полей. Учет макроскопических параметров в молекулярной динамике. термостаты и баростаты. Моделирование воды. Основные варианты моделей воды.

4. Расчёты энергий взаимодействия.

Расчёты свободной энергии в молекулярном моделировании. Основные методы. Расчёт точечных аминокислотных замен. Пути параметризации нестандартных молекул для молекулярной динамики. Расчет энергий связывания биомакромолекул. Молекулярные докинг. Основные понятия. Используемые функции оценки энергии.

5. Анализ данных молекулярного моделирования.

Методы и подходы к анализу данных молекулярной динамики и молекулярного моделирования. Сравнение данных моделирования с экспериментальными данными.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Молекулярное моделирование: теория и практика [Текст]/Х.-Д. Хёльте [и др.] , -М., БИНОМ. Лаб. знаний, 2010
Фонд литературы кафедры
2. Докинг. Молекулярное моделирование для разработки лекарств (2017) | Сулимов Владимир Борисович, Сулимов Алексей Владимирович
3. Основы моделирования молекулярной динамики (2018) Галимзянов Б.Н.

Дополнительная литература

Фонд литературы кафедры

1. Molecular Modelling for Beginners, 2nd Edition. Alan Hinchliffe
2. Molecular Modeling Basics. By Jan H. Jensen
3. Computational Chemistry and Molecular Modeling Principles and Applications. K. I. RamachandranDeepa GopakumarKrishnan Namboori
4. An Introduction to Molecular Dynamics. Mark S. Kemp

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. <http://ctem.web.cmu.edu/>
2. www.matter.org.uk/tem/
3. <http://www.cmca.uwa.edu.au/access/training>
4. <http://www.microscopy.info/Microscopy/Guide>
5. database.iem.ac.ru/mincryst/descript.htm
6. www.crystallography.net
7. <http://lib.mipt.ru>– электронная библиотека Физтеха.
8. <http://www.Sci-lib.com> – Большая научная библиотека.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. В процессе самостоятельной работы обучающихся возможно использование таких программных средств как Mathcad, Matlab для решения физических задач и моделирования изучаемых процессов на компьютере.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Для успешного освоения курса, помимо посещения лекций, от студентов требуется самостоятельная работа в объеме не менее чем те часы, которые указаны для каждого раздела программы. В основном, это время отводится на самостоятельное повторение материала лекций, чтения рекомендованной литературы и подготовку к промежуточным тестированиям, которые проводятся для текущего контроля за усвоением материала. Всего предполагается провести за семестр одну промежуточную контрольную, а также ряд проверочных работ. Студенты, успешно прошедшие данную форму промежуточного контроля, допускаются к сдаче зачета по дисциплине.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Природоподобные технологии и биомиметический дизайн материалов и систем Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра нано, био, информационных и когнитивных технологий
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Зачет	
Разработчик:	А.В. Швецов, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.2 Владеет навыком руководства малым коллективом в сфере своей профессиональной деятельности
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Основы структурной биоинформатики и молекулярного моделирования» обучающийся должен:

знать:

- фундаментальные понятия, законы, теории и формулы, описывающие поведения макромолекул;
- основные законы по которым строятся взаимодействия внутри биомacroмолекулярных систем;
- теоретические основы молекулярного моделирования.

уметь:

- анализировать биомacroмолекулярные структуры;
- применять современные методики молекулярного моделирования;
- применять современные методы молекулярной реконструкции биомолекул;
- эффективно использовать современные информационные технологии и ресурсы для получения необходимых знаний по интересующей научной проблеме.

владеть:

- специальной терминологией в области структурной биоинформатики и молекулярного моделирования;
- методиками построения молекулярных моделей;
- основными методиками молекулярной динамики;
- основными методами и подходами совместного анализа экспериментальных данных и данных молекулярного моделирования.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В целях текущего контроля успеваемости предусмотрен краткий опрос по темам предыдущих занятий по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Понятие о структуре биомacroмолекул. Основные элементы биомacroмолекулярных структур.
2. Структурная биоинформатика. Основные понятия. Гомологическое моделирование.
3. Молекулярное моделирование. Потенциальные функции и молекулярные поля. Принципы построения молекулярных полей.
4. Учет макроскопических параметров в молекулярной динамике. термостаты и баростаты.
5. Моделирование воды. Основные варианты моделей воды.
6. Расчёты свободной энергии в молекулярном моделировании. Основные методы.

7. Расчёт точечных аминокислотных замен.
8. Пути параметризации нестандартных молекул для молекулярной динамики.
9. Расчет энергий связывания биомакромолекул
10. Молекулярные докинг. Основные понятия. Используемые функции оценки энергии.
11. Методы и подходы к анализу данных молекулярной динамики и молекулярного моделирования.
12. Сравнение данных моделирования с экспериментальными данными.

Критерии оценивания

1. Оценка «зачтено» выставляется студенту, который
 - прочно усвоил предусмотренный программный материал;
 - правильно, аргументировано ответил на все вопросы, с приведением примеров;
 - показал глубокие систематизированные знания, владеет приемами рассуждения и сопоставляет материал из разных источников: теорию связывает с практикой, другими темами данного курса, других изучаемых предметов
2. Оценка «не зачтено» Выставляется студенту, который не справился с 50% вопросов билета, в ответах на другие вопросы допустил существенные ошибки. Не может ответить на дополнительные вопросы, предложенные преподавателем, не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении зачета обучающемуся предоставляется 40 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на зачете не должен превышать двух астрономических часов.

Во время проведения зачета обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, конспектами лекций, а также любой справочной литературой.