

**ГОО ВПО Российско-Армянский (Славянский)
университет**


Директор Института
«07» июля 2025г., протокол № 21

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

**Наименование дисциплины: Современные компьютерные технологии
используемые в фундаментальной медицине**

Автор: к.б.н. Абелян Н.Н.

Направление подготовки: 30.05.01 Медицинская биохимия

Наименование образовательной программы: 30.05.01 Медицинская биохимия

1. АННОТАЦИЯ

1.1. Краткое описание содержания данной дисциплины;

Дисциплина посвящена изучению современных компьютерных технологий, используемых в фундаментальной и прикладной медицине. Особое внимание уделяется работе с биомедицинскими базами данных и информационными ресурсами, обеспечивающими хранение, обработку и анализ структурно-биологических и молекулярно-генетических данных.

В рамках курса рассматриваются методы биоинформатического анализа, моделирования и визуализации биомолекул, применение алгоритмов машинного обучения в медицине, а также использование специализированного программного обеспечения.

Курс носит междисциплинарный характер и ориентирован на формирование как теоретических знаний, так и практических навыков работы с современными программными инструментами.

1.2. Трудоемкость в академических кредитах и часах, формы итогового контроля (экзамен/зачет);

8 семестр – 2 з.е.(72 ч.) -зачет

1.3. Взаимосвязь дисциплины с другими дисциплинами учебного плана специальности (направления)

Дисциплина существенно расширяет и углубляет знания, полученные в рамках курсов по молекулярной биологии, биохимии, биофизике и информатике. Она формирует системное понимание современных вычислительных подходов к анализу биомедицинских данных и способствует развитию у студентов практических навыков работы с профильными программными средствами и специализированными базами данных, необходимыми для научных исследований и практического применения в фундаментальной и прикладной медицине.

1.4. Результаты освоения программы дисциплины:

Код компетенции	Наименование компетенции	Код индикатора достижения	Наименование индикатора достижений компетенций
-----------------	--------------------------	---------------------------	--

		компетенций	
ПК-2	Способен организовать контроль качества клинических лабораторных исследований на преаналитическом, аналитическом и постаналитическом этапах	ПК-2.1	Владеть навыками организации и проведения контроля качества клинических лабораторных исследований на аналитическом этапе, включая внутрилабораторный и внешний контроль качества
		ПК-2.2	Уметь интерпретировать результаты внутрилабораторного и внешнего контроля качества клинических лабораторных исследований
		ПК-2.3	Знать принципы разработки стандартных операционных процедур в области контроля качества на всех этапах лабораторных исследований
ПК-10	Способен разработать протокол, план, программу клинического исследования лекарственного препарата для медицинского применения, биомедицинского клеточного продукта, клинического и клинико-лабораторного испытания (исследования) медицинского изделия	ПК-10.1	Владеть правилами разработки целей и задач клинического исследования лекарственного препарата для медицинского применения, биомедицинского клеточного продукта, клинического и клинико-лабораторного испытания (исследования)

			медицинского изделия
		ПК-10.2	Уметь составлять дизайн и схему клинического исследования лекарственного препарата для медицинского применения, биомедицинского клеточного продукта, клинического и клинико-лабораторного испытания (исследования) медицинского изделия
		ПК-10.3	Знать общую клиническую симптоматику повреждения различных органов и систем организма человека
ПК-14	Способен выполнить прикладные и поисковые научные исследования и разработок в области медицины и биологии	ПК-14.1	Владеть навыками прикладных и поисковых научных исследований и разработок в области медицины и биологии, направленных на улучшение диагностики, скрининга и мониторинга заболеваний
		ПК-14.2	Уметь выбирать диагностически значимые лабораторные показатели
		ПК-14.3	Знать этиологию и патогенез заболеваний человека

2. УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

2.1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины - сформировать у студентов системное представление о современных компьютерных технологиях, применяемых в фундаментальной медицине, а также развить практические навыки работы с биомедицинскими данными, инструментами визуализации, анализа и моделирования биологических процессов.

Задачи дисциплины:

1. Ознакомить студентов с основными направлениями и задачами биоинформатики и вычислительной биомедицины.
2. Научить эффективно использовать биомедицинские базы данных для поиска и анализа информации о биологических молекулах.
3. Сформировать навыки визуализации и структурного анализа биомолекул с применением специализированных инструментов.
4. Дать представление о методах выравнивания биологических последовательностей и интерпретации результатов.
5. Познакомить с принципами молекулярного моделирования, докинга и молекулярной динамики.
6. Раскрыть подходы к компьютерному дизайну лекарственных соединений.
7. Объяснить роль и возможности искусственного интеллекта в задачах анализа биомедицинских данных и разработки лекарств.

2.2. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы (в академических часах и зачетных единицах) *(удалить строки, которые не будут применены в рамках дисциплины)*

Виды учебной работы	Всего, в акад. часах	Распределение по семестрам
		8 сем.
1	2	3
1. Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	48	72
1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	48	48
1.1.1. Лекции	16	16

1.1.2.Практические занятия, в т. ч.	32	32
1.2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	-	24
Итоговый контроль (Экзамен, Зачет, диф. зачет - указать)	зачет	зачет

2.3. Содержание дисциплины

2.3.1. Тематический план и трудоемкость аудиторных занятий (модули, разделы дисциплины и виды занятий) по рабочему учебному плану

Разделы и темы дисциплины	Всего (ак. часов)	Лекции (ак. часов)	Практ. Занятия (ак. часов)	Семинары (ак. часов)
1	2=3+4+5+6+7	3	4	5
Тема 1. Введение в биоинформатику	1	1		
Тема 2. Работа с биомедицинскими базами данных (NCBI, UniProt, PDB)	5	2	3	
Тема 3. Визуализация и структурный анализ биомолекул (PyMOL, VMD)	4	1	2	1
Тема 4. Выравнивание последовательностей: основные понятия и методы	4	2	2	
Тема 5. Молекулярное моделирование трёхмерных структур белков	6	2	4	
Тема 6. Молекулярный докинг: теория и практика	7	2	5	
Тема 7. Молекулярная динамика: методы и применение	7	2	5	
Тема 8. Вычислительные методы в разработке лекарственных средств	9	2	6	1
Тема 9. Применение искусственного интеллекта в дизайне и открытии лекарств	5	2	3	
ИТОГО	48	16	30	2

2.3.2. Краткое содержание разделов дисциплины в виде тематического плана

Тема 1. Введение в биоинформатику

Обзор истории и развития биоинформатики как междисциплинарной области. Основные задачи и направления исследований, роль вычислительных методов в анализе биологических данных и медицине.

Тема 2. Работа с биомедицинскими базами данных (NCBI, UniProt, PDB)

Знакомство с ключевыми биомедицинскими ресурсами и базами данных. Методы поиска, извлечения и анализа структурной и функциональной информации о биомолекулах.

Тема 3. Визуализация и структурный анализ биомолекул (PyMOL, VMD)

Методы трёхмерной визуализации белков и нуклеиновых кислот. Анализ пространственных структур и взаимодействий, использование специализированных программных средств.

Тема 4. Выравнивание последовательностей: основные понятия и методы

Принципы парного и множественного выравнивания биологических последовательностей. Алгоритмы и их применение для выявления гомологий и эволюционных связей.

Тема 5. Молекулярное моделирование трёхмерных структур белков

Методы построения и оценки трёхмерных моделей белков, включая гомологическое моделирование и предсказание конформаций.

Тема 6. Молекулярный докинг: теория и практика

Подходы к моделированию взаимодействия лиганда с биомолекулой. Алгоритмы докинга, оценка стабильности и специфичности комплексов.

Тема 7. Молекулярная динамика: методы и применение

Основы моделирования динамики биомолекул во времени. Использование молекулярной динамики для изучения конформационных изменений и взаимодействий.

Тема 8. Вычислительные методы в разработке лекарственных средств

Использование компьютерного моделирования, скрининга и оптимизации молекул на этапах дизайна новых препаратов.

Тема 9. Применение искусственного интеллекта в дизайне и открытии лекарств

Методы машинного обучения и ИИ для анализа биомедицинских данных, прогнозирования свойств соединений и ускорения процесса разработки лекарств.

2.3.3. Краткое содержание семинарских/практических занятий/лабораторного практикума

(Кратко изложить форму/формы проведения семинарских занятий).

Практические занятия проводятся в форме интерактивных семинаров, компьютерных практикумов и работы в малых группах. Основное внимание уделяется анализу

биомедицинских данных, работе с биоинформатическими базами, визуализации молекулярных структур, выполнению выравниваний, моделированию и интерпретации результатов. Студенты выполняют индивидуальные и групповые задания с использованием специализированного программного обеспечения и веб-ресурсов. Практика направлена на формирование навыков самостоятельного решения прикладных задач биомедицинского анализа и разработки цифровых моделей.

2.3.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

(Кратко представить перечень материально-технического оснащения, информационно-технических средств).

- Персональные компьютеры с выходом в интернет;
- Программное обеспечение для биоинформатического анализа, визуализации и моделирования (локальное и/или веб-ориентированное);
- Проекционное оборудование и мультимедийная техника для демонстрации материалов;
- Доступ к образовательным платформам, специализированным базам данных и научным электронным ресурсам (NCBI, UniProt, PDB и др.);
- Лицензии (при необходимости) или свободно распространяемые пакеты для работы с биомолекулярными структурами и анализа последовательностей.

2.4. Модульная структура дисциплины с распределением весов по формам контролей

Формы контролей	Вес формы (форм) текущего контроля в результирующей оценке текущего контроля (по модулям)		Вес формы промежуточного контроля в итоговой оценке промежуточного контроля		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей (семестровой оценке)		Веса результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля	
	М1 ¹	М2	М1	М2	М1	М2				
Вид учебной работы/контроля										
Контрольная работа (при наличии)										
Устный опрос (при наличии)										
Тест (при наличии)										
Лабораторные работы (при наличии)										
Письменные домашние задания (при наличии)										
Реферат (при наличии)										
Эссе (при наличии)										
Проект (при наличии)										
Другие формы (при наличии)										
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках промежуточных контролей										
Веса оценок промежуточных контролей в итоговых оценках промежуточных контролей										
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей										
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке										

¹ Учебный Модуль

промежуточных контролей								
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля								
Вес итогового контроля (Экзамен/зачет) в результирующей оценке итогового контроля								
	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$

3. Теоретический блок

3.1.1. Учебник(и):

1. Bourne P.E., Weissig H. (Eds.) *Structural Bioinformatics*. 2nd ed., Wiley-Blackwell, 2010.
2. Lesk A.M. *Introduction to Bioinformatics*. 5th ed., Oxford University Press, 2019.
3. Pevsner J. *Bioinformatics and Functional Genomics*. 3rd ed., Wiley-Blackwell, 2015.
4. Mount D.W. *Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis*. Cold Spring Harbor Press, 2nd ed., 2004.

3.1.2. Учебное(ые) пособие(я):

1. Степанов А.В. *Основы биоинформатики: от теории к практике*. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2021.
2. Каприн А.Д., Тюрин И.Н. *Цифровые технологии в биомедицине*. - М.: МЕДпресс-информ, 2020.
3. Белозеров Ю.Б., Дубинина Е.С. *Биоинформатика в задачах и примерах*. - СПб.: Лань, 2020.

3.1.7. Дополнительные материалы:

1. **RCSB Protein Data Bank (PDB)**
<https://www.rcsb.org>
Основная международная база 3D-структур белков и нуклеиновых кислот. Содержит инструменты анализа и визуализации.
2. **AlphaFold Protein Structure Database (EMBL-EBI)**
<https://alphafold.ebi.ac.uk>
База предсказанных структур белков на основе нейросетевой модели AlphaFold. Актуальна для визуализации и drug design.
3. **UniProt Knowledgebase (UniProtKB)**
<https://www.uniprot.org>

База белков с функциональной аннотацией, сведениями о доменах, вариациях и структурных участках.

4. **PubChem**

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

База химических соединений, пригодная для подбора лигандов, анализа свойств молекул, используемых в докинге.

5. **DrugBank**

<https://go.drugbank.com>

Подробная информация о лекарственных препаратах, их мишенях и механизмах действия. Используется в фармацевтической биоинформатике.

6. **SwissDrugDesign Tools (SwissDock, SwissADME, SwissTargetPrediction)**

<https://www.swissdrugdesign.ch>

Набор онлайн-инструментов для молекулярного докинга, оценки фармакокинетических свойств и предсказания мишеней.

7. **ChimeraX Tutorials (UCSF)**

<https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/tutorials.html>

Практические руководства по визуализации, манипуляциям с 3D-структурами, подготовке комплексов и анализу взаимодействий.

8. **EMBL-EBI Training Resources**

<https://www.ebi.ac.uk/training/>

Бесплатные онлайн-курсы, лекции и учебные модули по темам: структурная биоинформатика, молекулярное моделирование, базы данных.

9. **Rosalind.info**

<http://rosalind.info>

Платформа для практики алгоритмов и решения задач по биоинформатике. Упор на выравнивания, структуры, эволюцию.

4. Фонды оценочных средств

4.1. Планы практических и семинарских занятий

Планы включают темы по работе с биомедицинскими базами данных (NCBI, UniProt, PDB), визуализации и структурному анализу (PyMOL, ChimeraX), выравниванию последовательностей, молекулярному моделированию, докингу и молекулярной динамике. Каждое занятие содержит цели, задачи, пошаговую методику, список используемых инструментов и критерии оценки выполнения.

- загрузку и предварительную обработку 3D-структур;
- выравнивание белковых последовательностей и структур;
- проведение молекулярного докинга;
- анализ результатов молекулярной динамики;
- использование AlphaFold для предсказания структур.

Каждая работа сопровождается контрольными вопросами и образцами оформления отчёта.

4.3. Материалы по практической части курса

4.3.1. Учебно-методические пособия:

- Руководства по работе с PyMOL, VMD, AutoDock, Gromacs

4.3.2. Наглядно-иллюстративные материалы:

- Видеоуроки с демонстрацией шагов моделирования и анализа;
- Слайды с разбором типовых ошибок и рекомендациями.

4.4. Вопросы и задания для самостоятельной работы студентов

- Контрольные вопросы по теории выравнивания, структурной биоинформатики и молекулярного моделирования;
- Задания на анализ результатов выравнивания;
- Задания на анализ результатов докинга;
- Применение ИИ в drug discovery.

4.5. Тематика рефератов, эссе и других форм самостоятельных работ

- Современные методы структурного моделирования белков;
- Роль молекулярной динамики в исследовании лекарственных мишеней;
- Применение ИИ для предсказания структуры белков;
- Анализ и визуализация взаимодействий белок-лиганд.

5. Методический блок

5.1. Методика преподавания

5.1.1. Методические рекомендации для студентов по подготовке к семинарским, практическим занятиям, а также по организации самостоятельной работы

Для успешного освоения дисциплины студентам рекомендуется систематически готовиться к семинарским, практическим занятиям, выполняя следующие действия:

- **Изучение теоретического материала:** перед каждым занятием необходимо внимательно ознакомиться с соответствующим разделом учебника, учебного пособия или лекционными конспектами. Особое внимание следует уделять ключевым понятиям, алгоритмам и методам, представленным в курсе.
- **Работа с электронными ресурсами:** использовать рекомендованные электронные материалы, базы данных (RCSB PDB, UniProt, AlphaFold) и инструменты (PyMOL, ChimeraX, AutoDock) для закрепления теоретических знаний на практике.
- **Выполнение практических заданий:** своевременно выполнять практические работы в соответствии с методическими указаниями, оформлять отчёты и анализировать полученные результаты.

- **Активное участие в семинарах:** готовить ответы на вопросы и участвовать в обсуждениях, что способствует глубокому пониманию материалов и развитию аналитических навыков.
- **Организация самостоятельной работы:** систематически выполнять контрольные задания, тесты и дополнительные упражнения из банка заданий для самоконтроля. При возникновении сложностей рекомендуется обращаться к преподавателю или консультантам курса.
- **Подготовка к промежуточному и итоговому контролю:** использовать образцы экзаменационных билетов и методические рекомендации для решения типовых задач и тестов.
- **Рефлексия и анализ:** вести личный учебный дневник или заметки, фиксировать сложные моменты и прогресс в освоении материала, что способствует развитию навыков самостоятельного обучения и критического мышления.

Данная методика направлена на формирование у студентов устойчивых компетенций в области структурной биоинформатики, молекулярного моделирования и применения компьютерных технологий в фундаментальной медицине, а также на развитие практических навыков работы с современным программным обеспечением и биомедицинскими базами данных.