

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский
университет имени Н.И. Пирогова»**

**Министерства здравоохранения Российской Федерации
ФГАОУ ВО РНИМУ им Н.И.Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)**

Институт биомедицины (МБФ)

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института

Прохорчук Егор Борисович

**Доктор биологических наук,
Член-корреспондент
Российской академии наук**

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б.1.В.В.05.02 Компьютерное конструирование вакцин и антител
для образовательной программы высшего образования - программы специалитета
по специальности**

**06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология
направленность (профиль)
Биомедицина**

Год начала подготовки - 2024

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.05.02 Компьютерное конструирование вакцин и антител (далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология.

Направленность (профиль): Биомедицина.

Форма обучения: очная.

Составители:

№, п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы
-----------	---------------------------	---------------------------	-----------	--------------

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы
----------	---------------------------	---------------------------	-----------	--------------

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры

«Кафедра биоинформатики МБФ»

протокол от «___» _____ № _____

Зав. кафедрой

Лагунин Алексей

Александрович

Доктор биологических наук

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена ученым советом

Директор Института

Прохорчук Егор Борисович

Доктор биологических наук,

Член-корреспондент

Российской академии наук

« _____ »

протокол от «___» _____ 20__ № _____

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования – специалитет по специальности 06.05.02 Биомедицина, утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от «27» июля 2021 г. № 675 рук.
2. Устав и локальные нормативные акты Университета.
3. Общая характеристика образовательной программы.
4. Учебный план образовательной программы.

© федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации

1. Общие положения

1.1. Цель и задачи освоения дисциплины

1.1.1. Цель: Целью изучения дисциплины "Компьютерное конструирование вакцин и антител" является получение студентами основополагающих знаний в области применения методов биоинформатики в иммунологии

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения дисциплины:

- изучение и формирование навыков работы в области компьютерной вакцинологии;
- изучение и формирование навыков работы с интернет-ресурсами с иммунологическими базами данных и инструментами иммуноинформатики;
- получение основных навыков по визуализации и моделированию трехмерных структур антител;
- формирование базовых навыков использования методов биоинформатики для решения прикладных биомедицинских и клинических задач, эффективной диагностики и персонализированного лечения пациентов с иммунологическими заболеваниями.
- формирование системных знаний по биоинформатике, связанных с анализом нуклеотидных и аминокислотных последовательностей в области иммунологии;

1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерное конструирование вакцин и антител» изучается в 8, 9 семестре (ах) и относится к части, формируемой участниками образовательного процесса, Блока Б.1 «Дисциплины». Является дисциплиной по выбору.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8.0 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся в рамках образовательной программы должны освоить следующие дисциплины и практики: Иностранный язык; Теория вероятности и математическая статистика; Информатика; Биохимия; Биоинформатика; Иммунология.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для успешного прохождения практик: Преддипломная практика, НИР.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

8 семестр

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины
ПК-2 Способен проводить научные исследования в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины	
ПК-2.ИД1 Собирает и обрабатывает научную и научно-техническую информацию, в результате чего формулирует проверяемые гипотезы в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины.	Знать: основные особенности строения генов и белков Т клеточных рецепторов и МНС. Молекулярные основы формирования иммунного ответа.
	Уметь: пользоваться основными биоинформатическими онлайн ресурсами и компьютерными программами для проведения виртуального конструирования вакцин.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): проведения виртуального конструирования вакцин.
ПК-4 Способен руководить работами по исследованию лекарственных средств	
ПК-4.ИД1 Руководит и управляет доклиническими исследованиями лекарственных препаратов.	Знать: основные биоинформатические онлайн ресурсы и компьютерными программами для проведения виртуального конструирования вакцин. Методы и подходы, используемые при виртуальном конструировании вакцин.
	Уметь: формулировать цели и задачи исследования, планировать и распределять ресурсы для исследований в области иммуноинформатики.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): навыками выполнения исследований в области иммуноинформатики.
ПК-4.ИД2 Руководит работами по фармацевтической разработке лекарственных препаратов.	Знать: биоинформатические методы и подходы, используемые в исследованиях механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет.
	Уметь: использовать биоинформатические методы и подходы, информационные ресурсы и компьютерные программы для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): навыками использования биоинформатических информационных ресурсов и компьютерных программ для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет.

9 семестр

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины
ПК-2 Способен проводить научные исследования в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины	
ПК-2.ИД1 Собирает и обрабатывает научную и научно-техническую информацию, в результате чего формулирует проверяемые гипотезы в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины.	Знать: основные особенности строения генов и белков Т клеточных рецепторов и МНС. Молекулярные основы формирования иммунного ответа.
	Уметь: пользоваться основными биоинформатическими онлайн ресурсами и компьютерными программами для проведения компьютерного дизайна антител.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): проведения компьютерного дизайна антител.
ПК-4 Способен руководить работами по исследованию лекарственных средств	
ПК-4.ИД1 Руководит и управляет доклиническими исследованиями лекарственных препаратов.	Знать: основные биоинформатические онлайн ресурсы и компьютерными программами для проведения виртуального конструирования вакцин и компьютерного дизайна антител. Методы и подходы используемые при компьютерном дизайне антител.
	Уметь: формулировать цели и задачи исследования, планировать и распределять ресурсы для исследований в области иммуноинформатики.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): навыками выполнения исследований в области иммуноинформатики.
ПК-4.ИД2 Руководит работами по фармацевтической разработке лекарственных препаратов.	Знать: биоинформатические методы и подходы, используемые в исследованиях механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет
	Уметь: использовать биоинформатические методы и подходы, информационные ресурсы и компьютерные программы для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): навыками использования биоинформатических информационных ресурсов и компьютерных программ для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет.

2.Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость

Формы работы обучающихся / Виды учебных занятий / Формы промежуточной аттестации		Всего часов	Распределение часов по семестрам	
			8	9
Учебные занятия				
Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КРО), в т.ч.:		141	61	80
Лекционное занятие (ЛЗ)		32	16	16
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)		95	39	56
Коллоквиум (К)		14	6	8
Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.:		108	44	64
Подготовка к учебным аудиторным занятиям		54	22	32
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических заданий проектного, творческого и др. типов)		54	22	32
Промежуточная аттестация:				
Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:		12	3	9
Экзамен (Э)**		9	0	9
Зачет (З)*		3	3	0
Самостоятельная работа обучающихся при подготовке к промежуточной аттестации (СРПА)**		27	0	27
Общая трудоемкость дисциплины (ОТД)	в часах: ОТД = КРО+СРО+КРПА+СРПА	288	108	180
	в зачетных единицах: ОТД (в часах): 36	8,00	3,00	5,00

* Время для проведения промежуточной аттестации в форме зачёта выделяется в рамках контактной работы (ДВЗ) Проведение промежуточной аттестации в форме зачёта организуется в соответствии с расписанием занятий.

** Промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине в форме экзамена организуется в рамках экзаменационной сессии согласно расписанию экзаменов. Время на подготовку к экзамену и его прохождение устанавливается учебным планом образовательной программы.

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

8 семестр

№ п /п	Шифр компетенции	Наименование раздела, темы дисциплины	Содержание раздела и темы в дидактических единицах
Раздел 1. Раздел 1. Основы иммуноинформатики			
1	ПК-2.ИД1, ПК-4.ИД1, ПК-4.ИД2	Тема 1. Основы иммуноинформатики	Базы данных эпителий, аллергенов, МНС аллелей и Т-клеточных рецепторов (TCR). Предсказание аллергенности белков. Анализ последовательностей МНС. Анализ последовательностей TCR. Анализ последовательностей антител.
Раздел 2. Компьютерное конструирование вакцин			
1	ПК-2.ИД1, ПК-4.ИД1, ПК-4.ИД2	Тема 1. Компьютерное конструирование вакцин	Компьютерное создание вакцин. Предсказание Т и В эпитопов. Предсказание опухолевых неопитопов.
Раздел 3. Раздел 3. Профилирование Т и В клеток			
1	ПК-2.ИД1, ПК-4.ИД1, ПК-4.ИД2	Тема 1. Профилирование Т и В клеток	Одноклеточное секвенирование. Биоинформатическое профилирование Т и В клеток на основе результатов секвенирования.

9 семестр

№ п /п	Шифр компетенции	Наименование раздела, темы дисциплины	Содержание раздела и темы в дидактических единицах
Раздел 1. Раздел 4. Структурная биоинформатика в иммунологии			
1	ПК-2.ИД1, ПК-4.ИД1, ПК-4.ИД2	Тема 1. Структурная биоинформатика в иммунологии	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей. Молекулярная динамика. Валидация моделей белков. Расчет энергии связывания в системе белок-белок и белок-пептид.
Раздел 2. Компьютерное конструирование антител			
1	ПК-2.ИД1, ПК-4.ИД1, ПК-4.ИД2	Тема 1. Компьютерное конструирование антител	Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования. Введение в AutoDock Vina. Докинг антитела с антигеном в AutoDock Vina. Компьютерное конструирование антител.

3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися

Разделы и темы дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не предусмотрены.

4. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем при проведении занятий

№ п/п	Виды учебных занятий*	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименования разделов (при наличии), тем, учебных занятий	Количество часов контактной работы	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости***	
					КП	ОУ
1	2	3	4	5	6	7
8 семестр						
Раздел 1. Раздел 1. Основы иммуноинформатики						
Тема 1. Основы иммуноинформатики						
1	ЛЗ	Геномика и протеомика МНС аллелей	2	Д	1	1
2	ЛЗ	Геномика и протеомика Т-клеточных рецепторов	2	Д	1	1
3	ЛЗ	Геномика и протеомика антител	2	Д	1	1
4	ЛЗ	Биоинформатические исследования аллергий	2	Д	1	1
5	ЛПЗ	Строение, классификация и базы данных МНС аллелей	3	Т	1	1
6	ЛПЗ	Анализ последовательностей МНС аллелей	3	Т	1	1
7	ЛПЗ	Анализ последовательностей TCR	3	Т	1	1
8	ЛПЗ	Анализ последовательностей антител	3	Т	1	1
9	ЛПЗ	Базы данных аллергенов, предсказание аллергенности и кросс-реактивности	3	Т	1	1
10	К	Коллоквиум по модулю 1	3	Р	1	1
Раздел 2. Компьютерное конструирование вакцин						
Тема 1. Компьютерное конструирование вакцин						
11	ЛЗ	Компьютерное конструирование вакцин.	2	Д	1	1
12	ЛЗ	Предсказание Т и В эпитопов.	2	Д	1	1
13	ЛПЗ	Базы данных и предсказание Т эпитопов	3	Т	1	1
14	ЛПЗ	Базы данных и предсказание В эпитопов	3	Т	1	1
15	ЛПЗ	Использование баз данных COSMIC и IEDB для поиска неоэпитопов	3	Т	1	1
16	ЛПЗ	Использование результатов секвенирования геномов опухолей для поиска неоэпитопов	3	Т	1	1
17	ЛПЗ	Компьютерное конструирование вакцин (часть 1)	3	Т	1	1
18	ЛПЗ	Компьютерное конструирование вакцин (часть 2)	3	Т	1	1
Раздел 3. Раздел 3. Профилирование Т и В клеток						
Тема 1. Профилирование Т и В клеток						
19	ЛЗ	Одноклеточное секвенирование в иммунологии	2	Д	1	1
20	ЛЗ	Одноклеточное секвенирование в иммунологии	2	Д	1	1
21	ЛПЗ	Анализ данных одноклеточного секвенирования	3	Т	1	1
22	ЛПЗ	Профилирование Т и В клеток на основе результатов секвенирования	3	Т	1	1
23	К	Коллоквиум по модулю 2,3	3	Р	1	1
24	З	зачёт	3	ПА		1
		Всего в семестре	64		23	23
9 семестр						
Раздел 1. Раздел 4. Структурная биоинформатика в иммунологии						
Тема 1. Структурная биоинформатика в иммунологии						
25	ЛЗ	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий.	2	Д	1	1
26	ЛЗ	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей.	2	Д	1	1
27	ЛЗ	Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.	2	Д	1	1
28	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-белок и белок-пептид	2	Д	1	1
29	ЛПЗ	Ознакомление с программным комплексом SYBYL.	4	Т	1	1

№ п /п	Виды учебных занятий*	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименования разделов (при наличии), тем, учебных занятий	Количество часов контактной работы	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости***	
					КП	ОУ
1	2	3	4	5	6	7
30	ЛПЗ	Построение моделей эпитопов, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 1)	4	Т	1	1
31	ЛПЗ	Моделирование трехмерной структуры антитела методом гомологического моделирования (часть 1)	4	Т	1	1
32	ЛПЗ	Построение моделей эпитопов, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 2)	4	Т	1	1
33	ЛПЗ	Моделирование трехмерной структуры антитела методом гомологического моделирования (часть 2)	4	Т	1	1
34	ЛПЗ	Молекулярная динамика и валидация модели антитела	4	Т	1	1
35	К	Коллоквиум по модулю 4	4	Р	1	1
Раздел 2. Компьютерное конструирование антител						
Тема 1. Компьютерное конструирование антител						
36	ЛЗ	Компьютерное конструирование антител	2	Д	1	1
37	ЛЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени	2	Д	1	1
38	ЛЗ	Белок-белковые взаимодействия. Взаимодействие белок-лиганд	2	Д	1	1
39	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-лиганд	2	Д	1	1
40	ЛПЗ	Введение в AutoDock Vina	4	Т	1	1
41	ЛПЗ	Докинг антитела с антигеном в AutoDock Vina	4	Т	1	1
42	ЛПЗ	Моделирование белок-белковых взаимодействий	4	Т	1	1
43	ЛПЗ	Исследование связывания лигандов с мутантными белками	4	Т	1	1
44	ЛПЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 1)	4	Т	1	1
45	ЛПЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 2)	4	Т	1	1
46	ЛПЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 3)	4	Т	1	1
47	ЛПЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 4)	4	Т	1	1
48	К	Коллоквиум по модулю 5	4	Р	1	1
49	Э	Экзамен по дисциплине «Компьютерное конструирование вакцин и антител»	9	ПА	1	1
		Всего в семестре	89		24	24
		Всего по дисциплине	153		47	47

(* , **, *** смотри условные обозначения)

Условные обозначения

Виды учебных занятий*

Виды учебных занятий	Сокращённое наименование	
Лекционное занятие	Лекция	ЛЗ
Лабораторно-практическое занятие	Лабораторно-практическое	ЛПЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме занятия
Текущий рубежный контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу, модулю) дисциплины

Формы проведения текущего контроля успеваемости обучающихся ***

№	Формы проведения текущего контроля успеваемости обучающихся (ФПТКУ)	Техническое и сокращённое наименование		Возможность проведения текущего контроля успеваемости по видам контроля		
				Д	Т	Р
1	Контроль присутствия	Присутствие	КП	+		
2	Опрос устный	Опрос устный	ОУ		+	+

5. Промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине
Оценочные средства промежуточной аттестации

5.1. Формы промежуточной аттестации

Семестр	Форма промежуточной аттестации****	Форма проведения промежуточной аттестации
1	2	3
8 семестр	Зачет	Опрос устный
9 семестр	Экзамен	Контроль присутствия, Опрос устный

Условные обозначения ****

Формы промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
Экзамен	Экзамен	Э
Зачет	Зачет	З

6. Структура рейтинга по дисциплине

6.1. Обучающийся имеет право пройти промежуточную аттестацию по дисциплине или её части на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине в соответствующем семестре.

6.2. Критерии, показатели проведения текущего контроля успеваемости с использованием балльно-рейтинговой системы (по семестрам и формам промежуточной аттестации)

Рейтинг по дисциплине рассчитывается по результатам текущей успеваемости обучающегося. Тип контроля по всем формам контроля дифференцированный, выставляются оценки по шкале: "неудовлетворительно", "удовлетворительно", "хорошо", "отлично". Исходя из соотношения и количества контролей, рассчитываются рейтинговые баллы, соответствующие системе дифференцированного контроля.

8 семестр

Виды занятий		Формы проведения текущего контроля успеваемости		Кол-во контролей	Макс. кол-во баллов	Соответствие оценок рейтинговым баллам				
						ТК	ВТК	Отл.	Хор.	Удовл.
Лабораторно-практическое занятие	ЛПЗ	Опрос устный	ОУ	13	156	В	Т	12	8	4
Коллоквиум	К	Опрос устный	ОУ	2	352	В	Р	176	117	59
Сумма баллов по дисциплине за семестр					508					

9 семестр

Виды занятий		Формы проведения текущего контроля успеваемости		Кол-во контролей	Макс. кол-во баллов	Соответствие оценок рейтинговым баллам				
						ТК	ВТК	Отл.	Хор.	Удовл.
Лабораторно-практическое занятие	ЛПЗ	Опрос устный	ОУ	14	168	В	Т	12	8	4
Коллоквиум	К	Опрос устный	ОУ	2	352	В	Р	176	117	59
Сумма баллов по дисциплине за семестр					520					

Критерии выставления оценок при прохождении промежуточной аттестации в форме зачета (на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине (модулю) или её части в семестре)

8 семестр

Шкала оценивания	Критерии выставления оценки
«зачтено»	Рейтинговый балл — не менее 60 % (не менее 296 баллов) и Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре
«не зачтено»	Рейтинговый балл — менее 60 % (менее 296 баллов) и/или Получение оценки ниже «удовлетворительно» за прохождение хотя бы одного текущего рубежного контроля в семестре или не прохождение рубежного контроля

Критерии выставления оценок при прохождении промежуточной аттестации в форме экзамена (на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине (модулю) или её части)

9 семестр

Шкала оценивания	Критерии выставления оценки
«отлично»	Рейтинговый балл не менее 90 % (не менее 900 баллов) и Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре

Шкала оценивания	Критерии выставления оценки
«хорошо»	Рейтинговый балл не менее 75 % (не менее 750 баллов) и Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре
«удовлетворительно»	Рейтинговый балл не менее 60 % (не менее 600 баллов) и Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре
«неудовлетворительно»	Рейтинговый балл менее 60 % (менее 600 баллов) и/или Получение оценки ниже «удовлетворительно» за прохождение хотя бы одного текущего рубежного контроля в семестре или не прохождение рубежного контроля

7. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

8 семестр

Перечень практических умений и навыков для подготовки к промежуточной аттестации в форме зачёта

- Знать основные особенности строения генов и белков Т клеточных рецепторов и МНС. Молекулярные основы формирования иммунного ответа.
- Пользоваться основными биоинформатическими онлайн ресурсами и компьютерными программами для проведения виртуального конструирования вакцин.
- Владеть навыками проведения виртуального конструирования вакцин.
- Знать основные биоинформатические онлайн ресурсы и компьютерными программами для проведения виртуального конструирования вакцин. Методы и подходы, используемые при виртуальном конструировании вакцин.
- Владеть навыками выполнения исследований в области иммуноинформатики.
- Знать биоинформатические методы и подходы, используемые в исследованиях механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет
- Уметь использовать биоинформатические методы и подходы, информационные ресурсы и компьютерные программы для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет
- Владеть навыками использования биоинформатических информационных ресурсов и компьютерных программ для проведения исследований механизмов действия лекарственных средств на адаптивный и врожденный иммунитет

9 семестр

Перечень вопросов для подготовки к промежуточной аттестации в форме экзамена

1. Гены и строение МНС белков.
2. Гены и строение Т-клеточных рецепторов, CDR участки.
3. Образование антител. Размеры VDJ нуклеотидных последовательностей.
4. Аннотация клонотипа.
5. Классификация МНС и TCR человека.
6. Процессинг антигена и презентация эпитопа молекулой МНС I.
7. Эпитопы. Свойства эпитопов.
8. В- и Т- эпитопы.
9. Предсказание В эпитопов.
10. Предсказание Т эпитопов.
11. База данных IEDB.

12. Аллергены. Номенклатура аллергенов.
13. Изоаллергены
14. Кросс-реактивность
15. Особенности аллергенных В-эпитопов
16. Особенности аллергенных Т-эпитопов
17. Базы данных, связанные с аллергией
18. Компьютерное прогнозирование аллергенности
19. Компьютерное прогнозирование перекрестной реактивности аллергенов
20. Основные этапы дизайна вакцин
21. Приоритезация белков мишеней для вакцины
22. Анализ сети белок-белковых взаимодействий
23. Гомологичное моделирование и анализ топологии эпитопа
24. Молекулярный докинг эпитопов с аллелями МНС
25. Форматы файлов для молекул. Виды представления 3D-структур молекул. Генерация 3D-структур из 2D.
26. Молекулярная механика. Основные термы полей сил.
27. Силы Ван-дер-Ваальса.
28. Электростатика и частичные атомарные заряды.
29. Конформация молекул и конформационный поиск.
30. Аминокислоты, классификация по свойствам, заряд на молекулах, пептидная связь.
31. Силы, удерживающие структуру белка.
32. Основные вторичные структуры белка.
33. Доменная организация белка, структурная классификация белков.
34. Методы определения 3D-структуры белка.
35. База трехмерных структур макромолекул. Формат файла PDB.
36. Параметры, необходимые для полного описания взаимодействия белок-лиганд.
37. Специфичность, селективность, аффинность, насыщение связывания.
38. Модели взаимодействия белок-лиганд. Силы, участвующие во взаимодействии белок-лиганд.

39. Конформационные изменения при связывании. Кинетика связывания белок-лиганд. Время удержания.
40. Что такое докинг. Два основных расчетных модуля в программах докинга.
41. Какие типы генерации поз существуют в программах докинга. Как в докинге можно учесть подвижность белка-мишени.
42. Что такое оценочная функция. Какие типы оценочных функций существуют. Почему оценочные функции неточные.
43. Источники базовых соединений. Оптимизация лиганда. Какие модификации базовой структуры используют при оптимизации этой структуры.
44. Компьютерное конструирование антител.
45. На чем основан метод молекулярной динамики.
46. Какие подходы используют для моделирования белка в водном окружении и для ускорения расчетов молекулярной динамики.
47. Какие параметры рассчитывают из траектории молекулярной динамики.
48. Какие компоненты включает энергия Гибса. Как сложно их рассчитывать в системе белок-лиганд.
49. Метод MM-P(G)BSA
50. Метод пертурбации свободной энергии

Образец билета для проведения экзамена

ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)

Кафедра биоинформатики МБФ

Билет № _____

для проведения экзамена по дисциплине «Компьютерное конструирование вакцин и антител» по программе специалитета по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология
направленность (профиль) Биомедицина

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет
имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации
(ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России)

Кафедра биоинформатики

МБФ

Экзаменационный билет № 1

*для проведения экзамена по дисциплине
«Компьютерное конструирование вакцин и антител»*

по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология

специализация «Биомедицина»

1. Гены и строение МНС аллелей.
2. Предсказание Т эпитопов
3. Модели взаимодействия белок-лиганд. Силы, участвующие во взаимодействии белок-лиганд.
4. Аминокислоты, классификация по свойствам, заряд на молекулах, пептидная связь.

Заведующий кафедрой _____ / А.А. Лагунин

Кафедра биоинформатики МБФ

Заведующий кафедрой
Лагунин Алексей
Александрович
Доктор биологических наук

8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Методические указания для подготовки к занятиям лекционного типа

Внимательно прочитать материал предыдущей лекции;

Ознакомиться с учебным материалом по учебнику, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам с темой прочитанной лекции;

Внести дополнения к полученным ранее знаниям по теме лекции на полях лекционной тетради;

Записать возможные вопросы, которые следует задать преподавателю по материалу изученной лекции.

Методические указания для подготовки к занятиям семинарского типа

Внимательно изучить теоретический материал по конспекту лекции, учебникам, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам;

Подготовиться к выступлению на заданную тему, если данное задание предусмотрено по дисциплине;

Выполнить письменную работу, если данное задание предусмотрено по дисциплине;

Подготовить доклад, презентацию или реферат, если данное задание предусмотрено по дисциплине.

Методические указания для подготовки к коллоквиуму (текущий рубежный контроль)

изучить учебный материал по наиболее значимым темам и (или) разделам дисциплины в семестре.

Методические указания для подготовки к контрольной работе

изучить учебный материал по теме занятия или отдельным значимым учебным вопросам, по которым будет осуществляться опрос.

Методические указания для самостоятельной работы студентов (СРС)

Работу с учебной, учебно-методической и научной литературой, электронными образовательными ресурсами (например, просмотр видеолекций или учебных фильмов), конспектами обучающегося: чтение, изучение, анализ, сбор и обобщение информации, её конспектирование и реферирование, перевод текстов, составление профессиональных глоссариев;

Подготовку тематических сообщений и выступлений;

Выполнение письменных контрольных работ.

9. Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины

9.1. Перечень литературы по дисциплине:

№ п/п	Наименование, автор, год и место издания	Рекомендуется при изучении разделов дисциплины	Количество экземпляров в библиотеке	Электронный адрес ресурса
1	2	3	4	5
1	Основы общей иммунологии: учебное пособие для медицинских вузов, Ганковская Л. В., 2024 - 2025	Компьютерное конструирование вакцин Раздел 4. Структурная биоинформатика в иммунологии Раздел 1. Основы иммуноинформатики Раздел 3. Профилирование Т и В клеток Компьютерное конструирование антител	1349	
2	Иммунология: учебник, Хаитов Р. М., 2024 - 2025	Компьютерное конструирование вакцин Раздел 4. Структурная биоинформатика в иммунологии Раздел 1. Основы иммуноинформатики Раздел 3. Профилирование Т и В клеток Компьютерное конструирование антител	0	https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970477526.html
3	Биоинформатика: учебник, Часовских Н. Ю., 2024 - 2025	Компьютерное конструирование вакцин Раздел 4. Структурная биоинформатика в иммунологии Раздел 1. Основы иммуноинформатики Раздел 3. Профилирование Т и В клеток Компьютерное конструирование антител	0	https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html

9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе профессиональных баз данных, необходимых для освоения дисциплины

1. <http://eor.edu.ru> – портал электронных образовательных ресурсов
2. <http://www.elibrary.ru> – сайт научной электронной библиотеки
3. ЭБС «Консультант студента» www.studmedlib.ru
4. <http://mon.gov.ru> – сайт Минобрнауки РФ
5. <http://www.edu.ru/> – библиотека федерального портала «Российское образование» (содержит каталог ссылок на интернет-ресурсы, электронные библиотеки по различным вопросам образования)
6. <http://www.prilib.ru> – сайт Президентской библиотеки
7. <http://www.rusneb.ru> – сайт национальной электронной библиотеки
8. <https://www.r-project.org/> (основной сайт R)
9. <https://cran.r-project.org/> (архив пакетов для статистического анализа данных в R)
10. <http://www.bioconductor.org/> (Bioconductor – архив пакетов R, предназначенных для анализа молекулярно-биологических данных)
11. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
12. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
13. <http://www.drugbank.ca/>
14. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
15. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>
16. <https://clinicaltrials.gov/>
17. <http://www.chemspider.com/>
18. <http://zinc.docking.org/>
19. <http://www.rlsnet.ru/>
20. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
21. <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
22. <http://bidd.nus.edu.sg/group/drt/dart.asp>
23. <http://www.genome.jp/kegg/>
24. https://mcule.com/apps/1-click-docking/?utm_source=ccl&utm_medium=maillist&utm_campaign=1-click-docking
25. <http://www.way2drug.com>
26. <http://biomolecula.ru/insilico/>

9.3. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при наличии)

1. MS Windows в редакциях: 7 Pro, 10 Pro, 11 Pro (x86, x64) – лицензия бессрочно

2. MS Office в редакциях: «Standard», «Professional Plus» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
3. MS Visio в редакциях: «Professional» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
4. Astra Linux Special Edition, вариант лицензирования «Орел», РУСБ.10015-10 – лицензия бессрочно
5. Adobe Acrobat Reader – свободно распространяемое ПО
6. Гарант (справочная правовая система) – лицензия до 31.07.2027
7. FastStone Image Viewer – свободно распространяемое ПО
8. Яндекс Браузер для организаций – свободно распространяемое ПО
9. Платформа «1С:Предприятие 8», конфигурации «1С:Документооборот государственного учреждения», «1С:Университет ПРОФ», «1С:Медицина» – лицензия бессрочно
10. Единая цифровая образовательная среда РНИМУ им. Н.И. Пирогова – собственная разработка РНИМУ
11. МТС Линк платформа для проведения вебинаров – лицензия до 04.07.2027 г.
12. Антивирус Kaspersky endpoint Security – лицензия до 19.09.2027 г.
13. Архиватор 7-Zip – свободно распространяемое ПО
14. Платформа «Kinescore» - лицензия до 11.03.2027 г.
15. Система управления обучением (LMS) – лицензия бессрочная
16. Ubuntu – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
17. Debian – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
18. MS Office (Excel)
19. Adobe Acrobat
20. Автоматизированная образовательная среда университета
21. Балльно-рейтинговая система контроля качества освоения образовательной программы в автоматизированной образовательной системе университета.
22. R Studio
23. KNIME
24. PyMOL
25. AutoDock Vina
26. MS Office в редакциях: «Standard», «Professional Plus» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно

9.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее - сеть «Интернет»), как на территории Университета, так и вне ее.

Электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивает:

- доступ к учебному плану, рабочей программе дисциплины, электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам, указанным в рабочей программе дисциплины;

- формирование электронного портфолио обучающегося, в том числе сохранение его работ и оценок за эти работы.

Университет располагает следующими видами помещений и оборудования для материально-технического обеспечения образовательной деятельности для реализации образовательной программы дисциплины:

№ п/п	Наименование оборудованных учебных аудиторий	Перечень специализированной мебели, технических средств обучения
1	Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения	Компьютерный стол, Проектор мультимедийный, Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет», Стационарный компьютер, Стулья
2	Помещение для самостоятельной работы обучающихся, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации	Учебная мебель (столы, стулья), компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
3	Учебная аудитория для проведения промежуточной аттестации	Учебная мебель (столы и стулья для обучающихся), стол, стул преподавателя, персональный компьютер; набор демонстрационного оборудования (проектор, экран, колонки)

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения (состав определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению при необходимости). Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных в рабочей программе дисциплины, на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину.

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ), в том числе в случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий, к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам, состав которых определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению (при необходимости).

Обучающиеся из числа инвалидов обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.