

**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)**

**Медико-биологический факультет**

**«УТВЕРЖДАЮ»**

Декан медико-биологического факультета  
д-р биол. наук, проф.

\_\_\_\_\_ Е.Б. Прохорчук

«28» июня 2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б.1.В.В.5.2 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ВАКЦИН И  
АНТИТЕЛ»**

для образовательной программы высшего образования -  
программы специалитета  
по специальности

06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология

специализация: Биомедицина

Москва 2023 г.

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.5.2 «Компьютерное конструирование вакцин и антител» (Далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология.

Специализация: Биомедицина.

Форма обучения: очная

Рабочая программа дисциплины подготовлена на кафедре биоинформатики (далее – кафедра) ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России авторским коллективом под руководством заведующего кафедрой Лагунина Алексей Александровича, доктора биологических наук, профессора РАН.

Составители:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Веселовский Александр Владимирович	д-р биол. наук	профессор кафедры биоинформатики МБФ	ФГБНУ НИИ биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича	
2.	Лагунин Алексей Александрович	д-р биол. наук, проф. РАН	Зав. кафедрой биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры (Протокол № 8 от «26» июня 2023 г.).

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Кузиков Алексей Александрович	канд. биол. наук, доцент	и.о. зав. кафедрой биохимии МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена советом медико-биологического факультета, протокол № 7 от «28» июня 2023 г.

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

- 1) Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология (уровень специалитет), утвержденный Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 27.07.2021 № 675 (далее ФГОС3++).
- 2) Общая характеристика образовательной программы.
- 3) Учебный план образовательной программы.
- 4) Устав и локальные акты Университета.

## **1. Общие положения**

### **1.1. Цель и задачи освоения дисциплины**

1.1.1. Получение студентами основополагающих знаний в области применения методов биоинформатики в иммунологии.

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения программы дисциплины:

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

### **1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина Б.1.В.В.5.2 «Компьютерное конструирование вакцин и антител» изучается в 8, 9 семестре и относится к обязательной части Б1 Дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие дисциплины: 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 освоения следующих практик: Преддипломная, НИР.

### 1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

8 семестр

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

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

## 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												
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
<b>Учебные занятия</b>														
<i>Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КР), в т.ч.:</i>	<b>162</b>								<b>72</b>	<b>90</b>				
Лекционное занятие (ЛЗ)	36								18	18				
Семинарское занятие (СЗ)														
Практическое занятие (ПЗ)	102								48	64				
Практикум (П)														
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)														
Лабораторная работа (ЛР)														
Клинико-практические занятия (КПЗ)														
Специализированное занятие (СПЗ)														
Комбинированное занятие (КЗ)														
Коллоквиум (К)	9								6	8				
Контрольная работа (КР)														
Итоговое занятие (ИЗ)														
Групповая консультация (ГК)														
Конференция (Конф.)														
Иные виды занятий														
<i>Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.</i>	<b>90</b>								<b>36</b>	<b>54</b>				
Подготовка к учебным аудиторным занятиям	90								36	54				
Подготовка истории болезни														
Подготовка курсовой работы														
Подготовка реферата														
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических заданий проектного, творческого и др. типов)														
<b>Промежуточная аттестация</b>														
<i>Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:</i>														
Зачёт (З)														
Защита курсовой работы (ЗКР)														
Экзамен (Э)	9										9			
<i>Самостоятельная работа обучающихся при подготовке к промежуточной аттестации (СРПА), в т.ч.</i>														
Подготовка к экзамену	27										27			
<b>Общая трудоёмкость дисциплины (ОТД)</b>	<b>в часах: ОТД = КР+СРС+КРПА+СРПА</b>	<b>288</b>							<b>108</b>	<b>180</b>				
	<b>в зачетных единицах: ОТД (в часах):36</b>	<b>8</b>							<b>3</b>	<b>5</b>				

### 3. Содержание дисциплины

#### 3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

##### 8 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1.	ПК-2.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Раздел 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.
2.	ПК-2.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Раздел 2. Компьютерное конструирование вакцин	Компьютерное создание вакцин. Предсказание Т и В эпитопов. Предсказание опухолевых неозпитопов.
3.	ПК-2.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Раздел 3. Профилирование Т и В клеток	Одноклеточное секвенирование. Биоинформатическое профилирование Т и В клеток на основе результатов секвенирования.

##### 9 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1	ПК-2.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Раздел 4. 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.
2	ПК-2.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Раздел 5. 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

Тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не предусмотрено.

#### 4. Тематический план дисциплины

##### 4.1. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем

№ п/п	Виды учебных занятий/ формы промежуточной аттестации	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименование разделов (модулей) (при наличии). Порядковые номера и наименование тем (модулей) модулей. Темы учебных занятий.	Количество часов	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации***					
					КП	РЗ	ОУ	ТЭ		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
<b>8 семестр</b>										
1		Раздел 1. Основы иммуноинформатики	32							

1.1	ЛЗ	Геномика и протеомика МНС аллелей	2	Д	+						
1.2	ЛЗ	Геномика и протеомика Т-клеточных рецепторов	2	Д	+						
1.3	ЛЗ	Геномика и протеомика антител	2	Д	+						
1.4	ЛЗ	Биоинформатические исследования аллергий	2	Д	+						
1.5	СЗ	Строение, классификация и базы данных МНС аллелей	3	Т	+	+					
1.6	СЗ	Анализ последовательностей МНС аллелей	3	Т	+	+					
1.7	СЗ	Строение, классификация и базы данных Т-клеточных рецепторов	3	Т	+	+					
1.8	СЗ	Анализ последовательностей TCR	3	Т	+	+					
1.9	СЗ	Строение, классификация и базы данных антител	3	Т	+	+					
1.10	СЗ	Анализ последовательностей антител	3	Т	+	+					
1.11	СЗ	Базы данных аллергенов, предсказание аллергенности и кросс-реактивности	3	Т	+	+					
1.13	К	Коллоквиум по модулю 1	3	Р	+		+	+			
<b>Раздел 2. Компьютерное конструирование вакцин</b>			<b>24</b>								
2.1	ЛЗ	Компьютерное конструирование вакцин.	2	Д	+						
2.2	ЛЗ	Предсказание Т и В эпитопов.	2	Д	+						
2.3	ЛЗ	Анализ соматических мутаций в опухолевых геномах и определение неоэпитопов.	2	Д	+						
2.4	СЗ	Базы данных и предсказание Т эпитопов	3	Т	+	+					
2.5	СЗ	Базы данных и предсказание В эпитопов	3	Т	+	+					
2.6	СЗ	Использование баз данных COSMIC и IEDB для поиска неоэпитопов	3	Т	+	+					
2.7	СЗ	Использование результатов секвенирования геномов опухолей для поиска неоэпитопов.	3	Т	+	+					
2.8	СЗ	Компьютерное конструирование вакцин (часть 1)	3	Т	+	+					
2.9	СЗ	Компьютерное конструирование вакцин (часть 2)	3	Т	+	+					
<b>Раздел 3. Профилирование Т и В клеток</b>			<b>16</b>								
3.1	ЛЗ	Одноклеточное секвенирование в иммунологии	2	Д	+						
3.2	ЛЗ	Профилирование Т и В клеток на основе результатов секвенирования	2	Д	+						
3.3	СЗ	Анализ данных одноклеточного секвенирования (часть 1)	3	Т	+	+					
3.4	СЗ	Анализ данных одноклеточного секвенирования (часть 2)	3	Т	+	+					
3.5	СЗ	Профилирование Т и В клеток на основе результатов секвенирования	3	Т	+	+					

3.6	К	Коллоквиум по модулю 2,3	3	Р	+		+			
		<b>Всего за семестр</b>	<b>72</b>							
<b>9 семестр</b>										
<b>3</b>	<b>Раздел 3. Структурная биоинформатика в иммунологии</b>		<b>40</b>							
3.1	ЛЗ	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий.	2	Д	+					
3.2	ЛЗ	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей.	2	Д	+					
3.3	ЛЗ	Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.	2	Д	+					
3.4	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-белок и белок-пептид	2	Д	+					
3.5	СЗ	Ознакомление с программным комплексом SYBYL.	4	Т	+	+				
3.6	СЗ	Построение моделей эпитопов, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 1)	4	Т	+	+				
3.7	СЗ	Построение моделей эпитопов, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 2)	4	Т	+	+				
3.8	СЗ	Моделирование трехмерной структуры антитела методом гомологического моделирования (часть 1)	4	Т	+	+				
3.9	СЗ	Моделирование трехмерной структуры антитела методом гомологического моделирования (часть 2)	4	Т	+	+				
3.1 0	СЗ	Молекулярная динамика и валидация модели антитела (часть 1)	4	Т	+	+				
3.1 1	СЗ	Молекулярная динамика и валидация модели антитела (часть 2).	4	Т	+	+				
3.1 2	К	Коллоквиум по модулю 4	4	Р	+		+			
<b>4</b>	<b>Раздел 5. Компьютерное конструирование антител.</b>		<b>50</b>							
4.1	ЛЗ	Компьютерное конструирование антител	2	Д	+					
4.2	ЛЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени	2	Д	+					
4.3	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд	2	Д	+					
4.4	ЛЗ	Белок-белковые взаимодействия	2	Д	+					
4.5	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-лиганд	2	Д	+					
4.6	СЗ	Введение в AutoDock Vina	4	Т	+	+				
4.7	СЗ	Докинг антитела с антигеном в AutoDock Vina (часть 1)	4	Т	+	+				

4.8	СЗ	Докинг антитела с антигеном в AutoDock Vina (часть 2)	4	Т	+	+				
4.9	СЗ	Моделирование белок-белковых взаимодействий	4	Т	+	+				
4.10	СЗ	Исследование связывания лигандов с мутантными белками	4	Т	+	+				
4.11	СЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 1)	4	Т	+	+				
4.12	СЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 2)	4	Т	+	+				
4.13	СЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 3)	4	Т	+	+				
	СЗ	Компьютерное конструирование антител (часть 4)	4	Т	+	+				
4.14	К	Коллоквиум по модулю 5	4	Р	+		+			
		<b>Всего за семестр:</b>	<b>90</b>							
		<b>Промежуточная аттестация:</b>	<b>9</b>							
		<b>Всего по дисциплине:</b>	<b>171</b>							

Условные обозначения:

Виды учебных занятий и формы промежуточной аттестации \*

Виды учебных занятий, формы промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
Лекционное занятие	Лекция	ЛЗ
Семинарское занятие	Семинар	СЗ
Практическое занятие	Практическое	ПЗ
Практикум	Практикум	П
Лабораторно-практическое занятие	Лабораторно-практическое	ЛПЗ
Лабораторная работа	Лабораторная работа	ЛР
Клинико-практические занятия	Клинико-практическое	КПЗ
Специализированное занятие	Специализированное	СЗ
Комбинированное занятие	Комбинированное	КЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К
Контрольная работа	Контр. работа	КР
Групповая консультация	Групп. консультация	КС
Конференция	Конференция	Конф.
Зачёт	Зачёт	З
Защита курсовой работы	Защита курсовой работы	ЗКР
Экзамен	Экзамен	Э

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)\*\*

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности на занятиях по теме.
Текущий рубежный (модульный) контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу) дисциплины
Текущий	Итоговый		Оценка усвоения обучающимся знаний,

итоговый контроль		И	умений и опыта практической деятельности по темам (разделам) дисциплины
-------------------	--	---	-------------------------------------------------------------------------

**Формы проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации обучающихся /виды работы обучающихся/ \*\*\***

№	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся (ФТКУ) ***	Техническое и сокращённое наименование		Виды работы обучающихся (ВРО) ***	Типы контроля
1	Контроль присутствия (КП)	Присутствие	КП	Присутствие	Присутствие
2	Учет активности (А)	Активность	А	Работа на занятии по теме	Участие
3	Опрос устный (ОУ)	Опрос устный	ОУ	Выполнение задания в устной форме	Выполнение обязательно
4	Опрос письменный (ОП)	Опрос письменный	ОП	Выполнение задания в письменной форме	Выполнение обязательно
5	Опрос комбинированный (ОК)	Опрос комбинированный	ОК	Выполнение заданий в устной и письменной форме	Выполнение обязательно
6	Тестирование в электронной форме (ТЭ)	Тестирование	ТЭ	Выполнение тестового задания в электронной форме	Выполнение обязательно
7	Проверка реферата (ПР)	Реферат	ПР	Написание (защита) реферата	Выполнение обязательно
8	Проверка лабораторной работы (ЛР)	Лабораторная работа	ЛР	Выполнение (защита) лабораторной работы	Выполнение обязательно
9	Подготовка учебной истории болезни (ИБ)	История болезни	ИБ	Написание (защита) учебной истории болезни	Выполнение обязательно
10	Решение практической (ситуационной) задачи (РЗ)	Практическая задача	РЗ	Решение практической (ситуационной) задачи	Выполнение обязательно
11	Подготовка курсовой работы (ПКР)	Курсовая работа	ПКР	Выполнение (защита) курсовой работы	Выполнение обязательно
12	Клинико-практическая работа (КПР)	Клинико-практическая работа	КПР	Выполнение клинико-практической работы	Выполнение обязательно
13	Проверка конспекта (ПК)	Конспект	ПК	Подготовка конспекта	Выполнение обязательно
14	Проверка контрольных нормативов (ПКН)	Проверка нормативов	ПКН	Сдача контрольных нормативов	Выполнение обязательно
15	Проверка отчета (ПО)	Отчет	ПО	Подготовка отчета	Выполнение обязательно
16	Контроль выполнения домашнего задания (ДЗ)	Контроль самостоятельной работы	ДЗ	Выполнение домашнего задания	Выполнение обязательно, Участие
17	Контроль изучения электронных образовательных ресурсов (ИЭОР)	Контроль ИЭОР	ИЭОР	Изучения электронных образовательных ресурсов	Изучение ЭОР

**5. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине**

**5.1. Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины**

Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения дисциплины – согласно п. 1.3. и содержанием дисциплины – согласно п.3. настоящей рабочей программы дисциплины.

## 5.2. Формы проведения текущего контроля успеваемости

Текущий контроль успеваемости обучающегося в семестре осуществляется в формах, предусмотренных тематическим планом настоящей рабочей программы дисциплины (см. п. 4.1).

## 5.3. Критерии, показатели и оценочные средства текущего контроля успеваемости обучающихся

### 5.3.1. Условные обозначения:

#### Типы контроля (ТК)\*

Типы контроля		Тип оценки
Присутствие	П	наличие события
Участие (дополнительный контроль)	У	дифференцированный
Изучение электронных образовательных ресурсов (ЭОР)	И	наличие события
Выполнение (обязательный контроль)	В	дифференцированный

#### Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)\*\*

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**	Сокращённое наименование		Содержание
	Дисциплинирующий	Д	
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности на занятиях по теме.
Текущий рубежный (модульный) контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу, модулю) дисциплины
Текущий итоговый контроль	Итоговый	И	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам, модулям) дисциплины

### 5.3.2. Структура текущего контроля успеваемости по дисциплине

8 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы						
				ТК*	ВТК**	Max.	Min.	Шаг
Лекционное занятие	ЛЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
				П	Д	1	0	0
Практическое занятие	СЗ	Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
				В	Т	10	0	1
Коллоквиум (1)	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
				В	Р	30	0	1
				В	Р	20	0	1

Коллоквиум (2)	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Опрос устный	ОК	В	Р	30	0	1

### 9 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы						
				ТК*	ВТК**	Max.	Min.	Шаг
Лекционное занятие	ЛЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
Практическое занятие	СЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
Коллоквиум	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Опрос устный	ОК	В	Р	30	0	1

### 5.3.3. Весовые коэффициенты текущего контроля успеваемости обучающихся (по видам контроля и видам работы)

### 8 семестр

Вид контроля	План %	Исходно		ФТКУ / Вид работы	ТК	План %	Исходно		Коэф.
		Баллы	%				Баллы	%	
Текущий дисциплинирующий контроль	5	26	9,77	Контроль присутствия	П	5	26	9,77	0,19
Текущий тематический контроль	60	160	60,15	Решение практической (ситуационной) задачи	В	60	160	60,15	0,38
Текущий рубежный (модульный) контроль	35	80	30,08	Опрос устный	В	20	60	22,56	0,33
				Тестирование в электронной форме	В	15	20	7,52	0,75
<b>Мах кол. баллов</b>	<b>100</b>	<b>266</b>							

### 9 семестр

Вид контроля	План %	Исходно		ФТКУ / Вид работы	ТК	План %	Исходно		Коэф.
		Баллы	%				Баллы	%	
Текущий дисциплинирующий контроль	5	27	11,89	Контроль присутствия	П	5	27	11,89	0,19
Текущий тематический контроль	55	160	70,48	Опрос комбинированный	В	55	160	70,48	0,52
Текущий рубежный (модульный) контроль	20	20	8,81	Опрос устный	В	20	20	8,81	1,00
Текущий итоговый контроль	20	20	8,81	Опрос устный	В	20	20	8,81	1,00
<b>Мах кол. баллов</b>	<b>100</b>	<b>227</b>							

5.4. Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины

Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины (см. п. 5.3.2) подготавливаются кафедрой и объявляются преподавателем накануне проведения текущего контроля успеваемости.

## **6. Организация промежуточной аттестации обучающихся**

8 семестр

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану – зачет.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:  
– на основании семестрового рейтинга

9 семестр.

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану - экзамен.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:  
– устный опрос по билетам, решение ситуационной задачи.
- 3) Перечень тем, вопросов, практических заданий для подготовки к промежуточной аттестации.

### ***Перечень вопросов для подготовки к промежуточной аттестации:***

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. Основной 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-Вальса.
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

## **7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

**7.1. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (по периодам освоения образовательной программы) – согласно п. 1.3. настоящей рабочей программы дисциплины**

**7.2. Критерии, показатели и порядок промежуточной аттестации обучающихся с использованием балльно-рейтинговой системы. Порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок**

8 семестр

**Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме**

## зачёта

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме зачёта проводится на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре, в соответствии с расписанием занятий по дисциплине, как правило на последнем занятии.

Время на подготовку к промежуточной аттестации не выделяется.

Критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) в форме зачета, а также порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

9 семестр

## Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме экзамена:

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме экзамена организуется в период экзаменационной сессии согласно расписанию экзаменов, на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестрах, в которых преподавалась дисциплина (модуль) и результатов экзаменационного испытания.

Порядок допуска обучающихся к промежуточной аттестации в форме экзамена, критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) в форме экзамена, а также порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

Условные обозначения:

Типы контроля (ТК)\*\*

Типы контроля		Тип оценки	
Присутствие	П	наличие события	
Выполнение (обязательный контроль)	В	дифференцированный	

Структура итогового рейтинга по дисциплине

Дисциплина	Компьютерное конструирование вакцин и антител		
Направление подготовки	Фундаментальная и прикладная биология		
Семестры	8	9	
Трудоемкость семестров в часах (Тдсі)	108	180	

Трудоемкость дисциплины в часах за весь период ее изучения (Тд)	288		
Весовые коэффициенты семестровой рейтинговой оценки с учетом трудоемкости (Кросі)			
Коэффициент экзаменационного семестрового рейтинга за все семестры изучения дисциплины			0,7
Экзаменационный коэффициент (Кэ)			0,3

### Структура промежуточной аттестации в форме экзамена

Форма промежуточной аттестации	Формы текущего контроля успеваемости/виды работы *		ТК**	Мах.	Весовой коэффициент, %	Коэффициент одного балла в структуре экзаменационной рейтинговой оценки	Коэффициент одного балла в структуре итогового рейтинга по дисциплине
Экзамен (Э)	Контроль присутствия	П	П	1	0	0	0
	Опрос устный	ОУ	В	50	100	2	0,6

### 7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для проведения промежуточной аттестации

Экзаменационные билеты для проведения экзамена по дисциплине

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

### 8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Освоение обучающимися учебной дисциплины складывается из контактной работы, включающей занятия лекционного типа (лекции) и занятия семинарского типа (семинарские занятия, коллоквиумы), а также самостоятельной работы. Контактная работа с обучающимися предполагает проведение текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Для подготовки к занятиям лекционного типа (лекциям) обучающийся должен:

- 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.

Для подготовки к занятиям семинарского типа обучающийся должен:

- 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.

Самостоятельная работа обучающихся является составной частью обучения и имеет целью закрепление и углубление полученных знаний, умений и навыков, поиск и приобретение новых знаний, выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям, текущему контролю успеваемости и промежуточной аттестации.

Выполнение домашних заданий осуществляется в форме:

- работы 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;
- подготовки тематических сообщений и выступлений;
- выполнения письменных контрольных работ.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине осуществляется в ходе проведения отдельного вида занятия – коллоквиума. Текущий контроль включает в себя текущий тематический контроль и текущий рубежный (модульный) контроль.

Для подготовки к текущему тематическому контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по теме занятия или отдельным значимым учебным вопросам, по которым будет осуществляться опрос.

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по наиболее значимым темам и (или) разделам дисциплины в семестре.

Промежуточная аттестация в форме зачета по дисциплине проводится на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре.

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

### 9.1. Литература по дисциплине:

№ п/п	Автор, название, место издания, издательство, год издания	Наличие литературы в библиотеке	
		Кол. экз.	Электр. адрес ресурса
1	2	3	4
1	Введение в биоинформатику [Текст] : [учеб. для вузов] / А. Леск ; пер. с англ. под ред. А. А. Миронова, В. К. Швядоса. - 2-е изд. - Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2015. - 318 с.	20	
2	Молекулярное моделирование [Электронный ресурс] : теория и практика : пер. с англ. / Х.-Д. Хельтье [и др.]. - 3-е изд. (эл.). - Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2015. - 322 с. - Режим доступа: <a href="http://marc.rsmu.ru:8020/marcweb2/Default.asp">http://marc.rsmu.ru:8020/marcweb2/Default.asp</a> .		<a href="http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/mb4x?usr_data=access(2med,0YI8ELM6704SLM6S-X097,ISBN9785996324019,1,1ms0ylsqdku,ru,ru)">http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/mb4x?usr_data=access(2med,0YI8ELM6704SLM6S-X097,ISBN9785996324019,1,1ms0ylsqdku,ru,ru)</a>

### 9.2. Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://eor.edu.ru> – портал электронных образовательных ресурсов
2. <http://www.elibrary.ru> – сайт научной электронной библиотеки
3. [www.studmedlib.ru](http://www.studmedlib.ru) – сайт электронной библиотеки студента «Консультант студента»
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.prlib.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](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**

1. Автоматизированная образовательная среда университета.
2. Балльно-рейтинговая система контроля качества освоения образовательной программы в автоматизированной образовательной системе университета.
3. Наличием свободно распространяемого установленного программного обеспечения (RStudio, KNIME, PyMOL, AutoDock).
4. Microsoft Office Word
5. Microsoft Office Excel
6. Adobe Acrobat

### **9.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения. Оснащение: наборы наглядных электронных материалов по различным разделам дисциплины, демонстрационные таблицы, презентации лекционного материала, видеофильмы; учебная мебель (столы, стулья), ноутбук, проектор, экран.

Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения (компьютерный класс): рабочее место преподавателя, учебная мебель, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду (компьютеризированные рабочие места).

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.

Организация обеспечена 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 и лиц с ОВЗ обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

Заведующий кафедрой

А.А. Лагунин

	Содержание	Стр.
1.	Общие положения	4
2.	Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость	7
3.	Содержание дисциплины (модуля)	8
4.	Тематический план дисциплины (модуля)	9
5.	Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)	13
6.	Организация промежуточной аттестации обучающихся	15
7.	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)	16
8.	Методические указания обучающимся по освоению дисциплины (модуля)	18
9.	Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	20