

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



Директор Института

«07» июля 2025г., протокол № 21

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины: Спецкурс 6 (Биоинформатика и базы данных в фундаментальной медицине)

Автор: к.б.н. Абемян 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;

Данная дисциплина направлена на освоение современных информационных технологий, применяемых в области фундаментальной и прикладной медицины. В центре внимания - работа с биомедицинскими информационными системами и базами данных, предназначенными для хранения, обработки и анализа данных о структуре биомолекул и генетической информации.

Курс охватывает основные методы биоинформатического анализа, техники моделирования и визуализации молекулярных структур, а также изучение применения машинного обучения в медицинской практике. Особое внимание уделяется использованию специализированных программных решений.

Программа курса интегрирует знания из разных научных областей и ориентирована на развитие как теоретических основ, так и практических навыков работы с современными цифровыми инструментами.

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

11 семестр – 3 з.е.(108 ч.) –зачет

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

Этот курс служит логическим продолжением и углублением знаний, полученных в таких областях, как молекулярная биология, биохимия, биофизика и информатика. Он способствует формированию комплексного понимания современных вычислительных методов обработки и анализа биомедицинских данных, а также развивает практические умения работы с профильным программным обеспечением и специализированными базами данных. Полученные знания и навыки являются важной основой для проведения научных исследований и их применения в фундаментальной и прикладной медицине.

1.4. Результаты освоения программы дисциплины:

Код компетенции	Наименование компетенции
ОПК-1	Готовностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием информационных, библиографических ресурсов, медико-биологической терминологии, информационно-коммуникационных технологий и учетом основных требований информационной безопасности
ПК-5	Готовностью к оценке результатов лабораторных, инструментальных, патолого-анатомических и иных исследований в целях распознавания состояния или установления факта наличия или отсутствия заболевания

2. УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

2.1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины - дать студентам целостное понимание современных компьютерных технологий, применяемых в фундаментальной медицине, а также развить практические умения работы с биомедицинскими данными, инструментами визуализации, анализа и моделирования биологических процессов.

Задачи дисциплины:

1. Познакомить студентов с основными направлениями и задачами биоинформатики и вычислительной биомедицины.
2. Научить эффективно пользоваться биомедицинскими базами данных для поиска и анализа информации о биомолекулах.
3. Сформировать навыки визуализации и анализа структуры биомолекул с помощью специализированных программ.
4. Объяснить методы выравнивания биологических последовательностей и интерпретацию полученных результатов.
5. Ознакомить с основами молекулярного моделирования, докинга и молекулярной динамики.
6. Рассмотреть подходы к компьютерному дизайну лекарственных препаратов.

7. Показать возможности искусственного интеллекта в анализе биомедицинских данных и разработке новых лекарств.

2.2. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы (в академических часах и зачетных единицах)

Виды учебной работы	Всего, в акад. часах	Распределение по семестрам
		11 сем.
1	2	3
1.Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	108	108
1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	32	32
1.1.1. Лекции	16	16
1.1.2. Практические занятия, в т. ч.	16	16
1.2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	76	76
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 и базы данных	4	2	2	
Тема 2. Визуализация и анализ структур биомолекул	4	2	2	
Тема 3. Выравнивание и сравнение биологических последовательностей	5	2	2	1
Тема 4. Молекулярное моделирование и докинг	5	3	2	

Тема 5. Молекулярная динамика и её применение	6	3	3	
Тема 6. Компьютерные методы и искусственный интеллект в разработке лекарств	8	4	3	1
ИТОГО	32	16	14	2

Тема 1. Введение в биоинформатику и базы данных

Что такое биоинформатика, её задачи и применение в медицине. Обзор основных биомедицинских баз данных (NCBI, UniProt, PDB) и способы работы с ними.

Тема 2. Визуализация и анализ структур биомолекул

Основы 3D-визуализации белков и нуклеиновых кислот с помощью программ PyMOL и VMD. Анализ и интерпретация структур.

Тема 3. Выравнивание и сравнение биологических последовательностей

Простые методы парного и множественного выравнивания для поиска сходств и эволюционных связей.

Тема 4. Молекулярное моделирование и докинг

Создание моделей белков и моделирование взаимодействия молекул, включая докинг лигандов.

Тема 5. Молекулярная динамика и её применение

Базовые принципы моделирования движений молекул и их значение для понимания биологических процессов.

Тема 6. Компьютерные методы и искусственный интеллект в разработке лекарств

Использование вычислительных методов, виртуального скрининга и ИИ для поиска и оптимизации новых лекарственных соединений.

2.3.2. Краткое содержание семинарских/практических занятий/лабораторного практикума

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.

2.3.3. 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										

¹ Учебный Модуль

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 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.

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

- Использование PDB для изучения структуры белков
- Инструменты онлайн-анализа последовательностей (BLAST, Clustal Omega и др.)
- Визуализация активного центра фермента: практический пример
- Как найти мутацию в гене с помощью биоинформатических ресурсов
- Простые подходы к анализу взаимодействия белок–лекарство
- Обзор онлайн-инструментов для моделирования белков

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.