
УТВЕРЖДЕНА

Решением Ученого совета
АНО ВО «Центральный университет»
«25» мая 2026 г.
Протокол № 2

**Рабочая программа дисциплины (модуля)
«Современные методы структурной биоинформатики»**

Направление подготовки: 02.04.01 Математика и компьютерные науки

Направленность (профиль) подготовки: III в биотехе

Специализация: Структурная биоинформатика

Квалификация (степень) выпускника: магистр

Форма обучения: очная

Срок освоения программы: 2 года

Год набора: 2026

**Москва
2026**

Содержание

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)	3
2. Перечень планируемых результатов обучения.....	5
3. Тематический план.....	8
4. Содержание дисциплины (модуля).....	8
5. Учебно-методическое обеспечение	10
6. Материально-техническое обеспечение	10
7. Методические и оценочные материалы	12

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)

Рабочая программа дисциплины (модуля) «Современные методы структурной биоинформатики» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – магистратура по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе, утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 810 от 23.08.2017 года.

Изучение дисциплины (модуля) «Современные методы структурной биоинформатики» позволяет подготовить специалистов, способных эффективно работать с трёхмерными структурами биомолекул, что является основой для рационального дизайна лекарств, ферментов и терапевтических белков.

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Настоящая дисциплина (модуль) включена в учебный план по программе подготовки магистратуры по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе и входит в обязательную часть Блока 1 как дисциплина по выбору, подлежащая обязательному изучению на специализации «Структурная биоинформатика».

Дисциплина (модуль) изучается на 1 курсе во 2 семестре.

Цель изучения дисциплины (модуля): формирование у обучающихся системного понимания современных методов анализа и интерпретации трёхмерных структур биомолекул, а также развитие навыков автоматизации, интеграции данных и вычислительного дизайна белков в рамках молекулярной биологии и биотехнологии.

Задачи изучения дисциплины (модуля):

- изучить основные базы данных и форматы представления структурной информации о белках и нуклеиновых кислотах;
- освоить принципы аннотации структур: координаты атомов, вторичные элементы, межмолекулярные взаимодействия, поверхности доступности;
- научиться применять ключевые алгоритмы: выравнивание структур, поиск консервативных мотивов, выделение доменов;
- овладеть базовыми подходами к вычислительному дизайну белков и оценке их стабильности;
- развить навыки построения пайплайнов анализа и критической интерпретации результатов структурной биоинформатики.

В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен:

знать:

- основные базы и типы данных структурной биоинформатики;
- принципы представления и аннотации структур (координаты, вторичная структура, взаимодействия, поверхности);
- ключевые алгоритмы: выравнивание, поиск мотивов, выделение доменов;
- базовые подходы к дизайну белков.

уметь:

- извлекать и подготавливать структурные данные;
- выполнять базовый анализ структур;
- собирать простой пайплайн для задач анализа и дизайна.

владеть:

- навыками автоматизации работы со структурными данными;
- инструментами анализа и интеграции структурных данных;
- базовыми приёмами вычислительного дизайна и оценки стабильности;
- навыками критической интерпретации результатов.

2. Перечень планируемых результатов обучения

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) при проведении учебных занятий в форме контактной работы обучающихся с педагогическими работниками Университета и в форме самостоятельной работы обучающихся:

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)
УК-1.	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1.	Знает основные принципы системного подхода и методы критического анализа, а также теоретические основы стратегического планирования и принятия решений
		УК-1.2.	Умеет применять методы системного анализа для выявления ключевых проблемных ситуаций, формулировать гипотезы и разрабатывать альтернативные стратегии действий на основе полученных данных
		УК-1.3.	Имеет практический опыт в проведении анализа реальных проблемных ситуаций в рамках проектов, способен вырабатывать и обосновывать стратегии действий, учитывая различные аспекты и последствия
УК-2.	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.1.	Знает основные методологии управления проектами, ключевые этапы жизненного цикла проекта и инструменты для планирования и контроля
		УК-2.2.	Умеет разрабатывать проектную документацию, устанавливать цели и задачи проекта, а также эффективно распределять ресурсы и управлять рисками на всех этапах его реализации
		УК-2.3.	Имеет практический опыт в управлении реальными проектами, включая планирование, исполнение и завершение, а также в оценке результатов и проведении анализа успешности проекта
ПК-1.	Способен определять общие формы и закономерности области искусственного	ПК-1.1.	Знает основные теоретические концепции и принципы искусственного интеллекта в биотехнологии, а также методы

	интеллекта в биологии, медицине или биотехнологии, обрабатывать и интерпретировать данные биологических исследований		обработки, анализа и визуализации данных в биологии, медицине или биотехнологии
		ПК-1.2.	Умеет проводить систематический анализ области профессиональной деятельности, выявлять закономерности и тенденции, моделировать основные биологические процессы и интерпретировать полученные результаты с использованием методов биоинформатики и искусственного интеллекта
		ПК-1.3.	Имеет практический опыт работы в области искусственного интеллекта в биотехнологии, включая участие в научных проектах, исследованиях или практических заданиях
ПК-2.	Способен математически корректно ставить и решать естественнонаучные и прикладные задачи в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-2.1.	Знает основные методы математического моделирования и теоретические основы современной биологии и биоинформатики, необходимые для корректной постановки задач
		ПК-2.2.	Умеет формулировать математические модели биологических процессов, выбирать адекватные методы решения и интерпретировать результаты в профессиональном контексте
		ПК-2.3.	Имеет практический опыт постановки и решения прикладных задач с использованием методов ИИ в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-3.	Способен решать задачи профессиональной деятельности и применять методы искусственного интеллекта в прикладных и фундаментальных исследованиях в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-3.1.	Знает принципы и методы решения профессиональных задач, включая применение профильно-специализированных знаний в области ИИ для фундаментальных и прикладных исследований в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-3.2.	Умеет применять математические и компьютерные методы, формулировать результаты и анализировать их последствия для научных и практических решений

		ПК-3.3.	Имеет опыт участия в проектах, где методы ИИ применялись для решения исследовательских и прикладных задач в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-5.	Способен передавать результаты прикладных задач в виде профессиональных рекомендаций в области искусственного интеллекта, биоинформатики и биотехнологии	ПК-5.1.	Знает методы формулирования рекомендаций и терминологию области искусственного интеллекта и биоинформатики
		ПК-5.2.	Умеет интерпретировать результаты анализа и моделирования и формулировать рекомендации для практического применения в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-5.3.	Имеет опыт разработки рекомендаций по результатам проектов в области искусственного интеллекта и биотехнологии

3. Тематический план

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Трудоемкость, академические часы				ТКУ (текущий контроль успеваемости)
		Очная форма				
		Аудиторная работа		Контроль	Самостояте льная работа	
		Лекции	Семинары (практичес кие занятия)			
1	Работа с данными и структурами белков	1	9		24	Домашнее задание
2	Основы и классические методы дизайна белков	1	9		25	Домашнее задание
3	Современные вычислительные подходы к дизайну белков	2	10	2	25	Домашнее задание
	Зачет с оценкой			6		Коллоквиум
Итого:		4	28	8	74	
Объем дисциплины (модуля) (в ак. ч.)		114				
Объем дисциплины (модуля) (в зач. ед.)		3				

4. Содержание дисциплины (модуля)

№п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Содержание дисциплины (модуля) по темам
1	Работа с данными и структурами белков	Базы данных: PDB, InterPro, Uniprot Скриптование и автоматизация работы со структурами. Операции с координатами. Подходы для восстановления протонирования и разметки взаимодействий. Разметка вторичной структуры. Алгоритмы пространственного сопоставления и структурного выравнивания. Алгоритмы выделения структурных доменов. Работа с мотивами – выделение и поиск по подструктуре. Алгоритмы построения поверхностей молекул. Нахождение и анализ полостей в структурах. Разметка свойств поверхности.
2	Основы и классические методы дизайна белков	Введение в дизайн белков. Интегрирование информации из разных источников. Выявление горячих точек для внесения замен. Принципы дизайна: эволюционный дизайн, рациональный дизайн, комбинаторный дизайн. Обзор современных задач дизайна. Rosetta как классический фреймворк дизайна белков. Энергетические функции, ротамерные модели и алгоритмы оптимизации. Задачи дизайна и оценки стабильности ($\Delta\Delta G$). Ограничения классических подходов.
3	Современные вычислительные подходы к дизайну белков	Современные генеративные методы дизайна белков. RFDiffusion. Обратный фолдинг. Дизайн хода остова. Глобальный и локальный дизайн: современные вычислительные пайплайны.

		Дизайн лекарственных пептидов и белков. Методы вычислительного дизайна связывания. Концепции и модели связывания, энтальпийный и энтропийный вклады. Дизайн ферментов. Стабилизация переходного состояния. Изменение субстратной специфичности. Дизайн мультисубъединичных белков и макро-конструкций.
--	--	---

5. Учебно-методическое обеспечение

Университет располагает полным набором лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, включая продукты отечественного производства.

Каждый студент в течение всего периода обучения получает индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечной системе и электронной информационно-образовательной среде университета. Эти системы предоставляют возможность доступа к ресурсам из любой точки, где есть подключение к сети Интернет, как на территории университета, так и за его пределами.

Студентам обеспечен удаленный доступ к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам.

Основная литература:

1. Костюков, В. В. Молекулярная механика биополимеров : монография / В.В. Костюков. — Москва : ИНФРА-М, 2025. — 140 с. — (Научная мысль). — DOI 10.12737/1010677. - ISBN 978-5-16-014913-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2178245>.

2. Антао, Т. Биоинформатика с Python: книга рецептов: Современные библиотеки и приложения Python для решения реальных задач вычислительной биологии : практическое руководство / Т. Антао ; пер. с англ. И. Л. Люско. — Москва : ДМК Пресс, 2023. - 345 с. — ISBN 978-5-93700-201-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2204233>.

Дополнительная литература:

1. Хельтье, Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зиппл, Д. Роньян, Г. Фолькерс. - 5-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 322 с. - ISBN 978-5-00101-724-0. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/1202050>.

2. Стефанов, В. Е. Биоинформатика : учебник для вузов / В. Е. Стефанов, А. А. Тулуб, Г. Р. Мавропуло-Столяренко. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 249 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-20194-9. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/583663>.

6. Материально-техническое обеспечение

Университет располагает материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работ обучающихся, предусмотренных учебным планом.

Помещения, которые представляют собой учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского (практического) типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования. Помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Изучение дисциплины (модуля) обеспечивается в учебных аудиториях, оснащенных:

- столами и стульями;
- компьютерной техникой;
- механическими калькуляторами;
- специализированным оборудованием, включая демонстрационное оборудование.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, в том числе приспособленные для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья, оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Обучающимся предоставляется доступ (в том числе удаленный) к ресурсам информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронным ресурсам (в том числе электронным библиотечным системам, современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам):

№	Наименование портала (издания, курса, документа)	Ссылка
1.	Научная электронная библиотека elibrary.ru библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp
2.	База данных для IT-специалистов	https://habr.com
3.	База данных ScienceDirect	https://www.sciencedirect.com
4.	Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации	https://minobrnauki.gov.ru/
5.	Федеральный портал «Российское образование»	https://www.edu.ru/
6.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"	http://window.edu.ru/
7.	Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов	http://school-collection.edu.ru/
8.	Федеральный центр информационно - образовательных ресурсов	http://fcior.edu.ru/

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), в том числе комплект лицензионного программного обеспечения, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

Наименование ПО	Производство	Лицензионное / свободно распространяемое
Операционные системы:		
Microsoft Imagine (Windows Client, Server)	зарубежное	лицензионное
Браузеры:		
Яндекс.Браузер	отечественное	свободно распространяемое
Google Chrome	зарубежное	свободно распространяемое
Офисные приложения:		
Microsoft Imagine (Visio, OneNote)	зарубежное	лицензионное
TeXstudio	зарубежное	свободно распространяемое
Adobe Acrobat Reader	зарубежное	свободно распространяемое

Программное обеспечение для планирования и учета времени:		
Toggle app	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления проектами:		
Microsoft Imagine (Project)	зарубежное	лицензионное
Системы управления базами данных:		
Microsoft Imagine (SQL Server)	зарубежное	лицензионное
Системы резервного копирования (backup):		
Acronis Backup Advanced for HyperV	зарубежное	лицензионное
Справочно-правовые системы:		
КонсультантПлюс: справочно-правовая система	отечественное	лицензионное
Средства антивирусной защиты:		
Kaspersky Endpoint Security для бизнеса Стандартный Russian Edition	отечественное	лицензионное
Среды разработки:		
Visual Studio Code	зарубежное	свободно распространяемое
Bash (Unix shell)	зарубежное	свободно распространяемое
Anaconda	зарубежное	свободно распространяемое
Robotic Operating System	зарубежное	свободно распространяемое
CopelliaSim	зарубежное	свободно распространяемое
Google Colaboratory	зарубежное	свободно распространяемое
Пакеты программных средств и библиотек:		
AutoPsy	зарубежное	свободно распространяемое
Interactive Disassembler (IDA)	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления библиографической информацией:		
Zotero	зарубежное	свободно распространяемое
Сервисы и службы:		
Bind	зарубежное	свободно распространяемое
Docker	зарубежное	свободно распространяемое

7. Методические и оценочные материалы

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

В процессе изучения дисциплины (модуля) «Современные методы структурной биоинформатики» в рамках текущего контроля успеваемости используются такие виды учебной работы, как лекции, семинары, домашние задания, коллоквиум, а также различные виды самостоятельной работы обучающихся по заданию преподавателя, направленные на развитие навыков профессиональной лексики, закрепление практических профессиональных компетенций, поощрение инициатив.

Лекция – систематическое, последовательное, монологическое изложение преподавателем учебного материала, как правило, теоретического характера.

В процессе лекций рекомендуется вести конспект лекций: кратко и схематично фиксировать основные идеи, выводы и обобщения лекции; выделять важные мысли, ключевые слова и термины. Необходимо отметить вопросы или материалы, которые вызывают затруднения, и попытаться найти ответы в рекомендованной литературе. Если

Электронный документ

разобраться в материале не удастся, следует сформулировать вопрос и задать его преподавателю на консультации или во время семинарского (практического) занятия.

Семинар – это форма учебной деятельности, проводимая в учебном заведении под руководством преподавателя, где студенты активно участвуют в обсуждениях, практических заданиях и других формах взаимодействия.

Для успешной подготовки к семинару рекомендуется заранее ознакомиться с темой занятия и основными материалами, чтобы иметь возможность активно участвовать в обсуждении. Также полезно подготовить вопросы и идеи для обсуждения, что поможет глубже понять материал и продемонстрировать заинтересованность.

Домашнее задание – набор задач по темам недели.

При работе над домашними заданиями важно внимательно ознакомиться с требованиями и сроками выполнения. Рекомендуется разбивать задания на этапы, чтобы избежать перегрузки и лучше усвоить материал, использовать различные источники информации, включая учебники и онлайн-ресурсы, для более глубокого понимания темы.

Коллоквиум – устные ответы на вопросы, список которых известен студенту заранее.

В процессе подготовки к коллоквиуму необходимо проанализировать учебные материалы, ознакомившись с лекциями, учебниками и дополнительными источниками, акцентируя внимание на ключевых темах. Рекомендуется создать структурированные конспекты, выделяя основные идеи, термины и формулы.

Самостоятельная работа – работа студентов, направленная на углубленное изучение отдельных тем и вопросов учебной дисциплины (модуля).

В процессе самостоятельной работы студенты взаимодействуют с рекомендованными материалами при минимальном участии преподавателя. Задачи студента включают работу с конспектами лекций (обработка текста), повторное изучение учебных материалов планов и тезисов ответов, изучение дополнительных тем, выполнение учебно-исследовательских заданий и другое.

Система оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Критерии получения уровня и оценивания сформированности компетенций по дисциплине (модулю) «Современные методы структурной биоинформатики»

Оценивание уровня учебных достижений обучающихся по дисциплине (модулю) осуществляется в виде текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю) осуществляется в форме *зачета с оценкой*, при этом проводится оценка компетенций, сформированных по дисциплине.

Для оценивания текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации используется десятибалльная шкала оценивания, которая соотносится с традиционной пятибалльной шкалой следующим образом, если иное не указано в syllabus дисциплины:

Десятибалльная оценка	Пятибалльная оценка	Общая характеристика результата обучения по дисциплине (модулю)
10	Отлично	Студент полностью владеет знаниями, изложенными в рабочей программе, и глубоко осмысляет дисциплину (модуль). Он самостоятельно и логически
9	Отлично	
8	Отлично	

Десятибалльная оценка	Пятибалльная оценка	Общая характеристика результата обучения по дисциплине (модулю)
		последовательно отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее важном. Умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя ключевые моменты и устанавливая причинно-следственные связи. Четко формулирует ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования, необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты дисциплины (модуля) с практическими задачами.
7	Хорошо	Студент обладает знаниями предмета почти в полном объеме рабочей программы и самостоятельно, логически последовательно и всесторонне отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее значимых моментах. Он умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя его ключевые аспекты и устанавливая причинно-следственные связи. Формулирует свои ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные ситуационные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования, необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты предмета с практическими задачами.
6	Хорошо	
5	Удовлетворительно	Студент обладает базовыми знаниями по дисциплине (модулю), но испытывает трудности при самостоятельных ответах и использует неточные формулировки. В ходе ответов он допускает ошибки, касающиеся сути вопросов. Студент способен решать только самые простые задачи и владеет лишь минимальным набором методов исследования.
4	Удовлетворительно	
3	Не сдан	Студент не овладел обязательным минимумом знаний по предмету и не может ответить на вопросы, даже если преподаватель задает дополнительные наводящие вопросы.
2	Не сдан	
1	Не сдан	

Дисциплина (модуль) «Современные методы структурной биоинформатики» оценивается следующим образом:

Активность	Вес	Количество	Описание
Домашние задания	40%	11	Набор задач по темам недели
Зачет с оценкой	60%	1	Коллоквиум - устные ответы на вопросы, список которых известен студенту заранее

Формула расчёта итоговой оценки по дисциплине (модулю) «Современные методы структурной биоинформатики»: $\langle 0,4 \times \text{Среднее за домашние задания} + 0,6 \times \text{Зачет с оценкой} \rangle$.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)

Примерные домашние задания

Домашнее задание 1. Анализ структуры белка и выделение функциональных элементов

1. Выберите белок из базы данных PDB (например, 1TIM — триозофосфатизомераза).
2. С помощью скрипта на Python (Biopython) или визуализации (PyMOL) выделите:
 - участки α -спиралей и β -слоёв (вторичная структура),
 - активный центр (по литературе или аннотации),
 - остатки, участвующие в каталитическом механизме.
3. Постройте поверхность белка и найдите полость в районе активного центра.
4. Проанализируйте, какие аминокислоты выстилают полость, и оцените их свойства (заряд, гидрофобность).
5. Оформите отчёт: скриншоты, список остатков, выводы о функциональной значимости.

Домашнее задание 2. Структурное выравнивание и поиск доменов

1. Выберите две гомологичные структуры одного белка из разных организмов (например, цитохром c из человека и дрожжей) из PDB.
2. Выполните структурное выравнивание с помощью инструментов: PDBeFold или PyMOL (**align**).
3. Рассчитайте RMSD между C α -атомами.
4. Выделите консервативные структурные мотивы и оцените их роль.
5. С помощью InterPro или CATH определите доменную архитектуру и сравните её между видами.
6. Оформите отчёт: значение RMSD, визуализация выравнивания, описание доменов.

Домашнее задание 3. Вычислительный дизайн белка: анализ стабильности и предсказание эффекта мутаций

1. Выберите белок с известной структурой и аннотацией мутаций (например, из базы ProTherm).
2. С помощью инструментов (например, HADDOCK, FoldX, или предсказательных серверов: mCSM, DUET) оцените изменение стабильности ($\Delta\Delta G$) при одной из мутаций.
3. Проанализируйте, как мутация влияет на:
 - гидрофобное ядро,
 - ионные пары,
 - водородные связи.
4. Объясните, почему мутация может быть стабилизирующей или дестабилизирующей.
5. Оформите отчёт: предсказанное $\Delta\Delta G$, визуализация изменений, биологическая

интерпретация.

Примерные вопросы к коллоквиуму

1. Какие данные хранятся в файле формата PDB?
2. Какой алгоритм используется для структурного выравнивания белков и что показывает RMSD?
3. В чём разница между первичной, вторичной и третичной аннотацией структуры?
4. Как определяются поверхности и полости в белковых структурах? Какие методы используются?
5. Что такое структурный мотив и как его можно выделить в белке?
6. Какие подходы используются в рациональном дизайне белков? Приведите пример.
7. Как работает энергетическая функция в фреймворке Rosetta? Какие вклады она учитывает?
8. Что такое обратный фолдинг и как он используется в современном дизайне белков?
9. Какие преимущества даёт использование RFDiffusion по сравнению с классическими методами дизайна?
10. Какие факторы учитываются при дизайне фермента с новой субстратной специфичностью?

Задания для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

№ п/п	Задание	Ответ	Компетенция
1.	Какой формат используется для хранения трёхмерных структур белков?	Формат PDB	УК-1
2.	Что означает аббревиатура PDB в структурной биоинформатике?	Protein Data Bank — база данных белковых структур	УК-2
3.	Какой параметр характеризует степень сходства двух структур после выравнивания?	RMSD (среднеквадратичное отклонение)	ПК-1
4.	Какой метод позволяет автоматизировать обработку множества структурных файлов?	Скриптование (на Python, Bash и др.)	ПК-2
5.	Как называется участок белка, отвечающий за связывание с лигандом?	Активный центр или сайт связывания	ПК-3
6.	Какой инструмент позволяет визуализировать поверхность белка и полости?	PyMOL, Chimera, HOLE	ПК-5
7.	Что такое вторичная структура белка и из каких элементов она состоит?	Локальные складки: α -спирали, β -слои, повороты	УК-1

8.	Какой алгоритм используется для поиска структурных аналогов в базе данных?	PDBeFold, DALI, CE	УК-2
9.	Что такое структурный домен?	Функциональный и структурно независимая часть белка	ПК-1
10.	Какой базе данных можно найти информацию о функциональных доменах белков?	InterPro, Pfam, CATH	ПК-2
11.	Что такое мотив в контексте структурной биоинформатики?	Короткий консервативный фрагмент структуры или последовательности	ПК-3
12.	Какой метод позволяет оценить изменение стабильности белка при мутации?	Расчёт $\Delta\Delta G$ (например, с помощью FoldX или mCSM)	ПК-5
13.	Что означает положительное значение $\Delta\Delta G$ при мутации?	Мутация дестабилизирует белок	УК-1
14.	Какой подход использует эволюционную информацию для дизайна белков?	Эволюционный дизайн (на основе MSA)	УК-2
15.	Какой фреймворк широко используется для рационального дизайна белков и расчёта энергии?	Rosetta	ПК-1
16.	Что такое обратный фолдинг в современных методах дизайна?	Генерация последовательности под заданную структуру	ПК-2
17.	Какой генеративный метод позволяет создавать новые белковые структуры с нуля?	RFDiffusion	ПК-3
18.	Какие вклады учитывает энергетическая функция в Rosetta?	Ван-дер-Ваальсовы, электростатические, сольватационные и др.	ПК-5
19.	Что такое ротамер в контексте дизайна белков?	Набор predetermined конформаций боковой цепи аминокислоты	УК-1
20.	Какой принцип лежит в основе дизайна фермента с новой активностью?	Стабилизация переходного состояния	ПК-3

		субстрата	
--	--	-----------	--