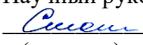


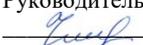


МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ПЕРЕДОВАЯ ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА

ИНСТИТУТ БИОТЕХНОЛОГИЙ, БИОИНЖЕНЕРИИ И ПИЩЕВЫХ СИСТЕМ

СОГЛАСОВАНО
Научный руководитель ОП
 Стоник В. А.
(подпись) (ФИО)

Руководитель ОП
 Чикалов И.В.
(подпись) (ФИО)

УТВЕРЖДАЮ
Декан Факультета промышленных биотехнологий и
биоинженерии
 Цыганков В.Ю.
(подпись) (И.О. Фамилия)
« 27 » 09 2022 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы оптимизации структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования

Направление подготовки 19.04.01 Биотехнология

магистерская программа «Биотехнология в разработке и производстве природных биопрепаратов и продуктов на их основе»

Форма подготовки очная

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 19.04.01 Биотехнология, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 10.08.2021 г. №737.

Рабочая программа обсуждена на заседании Факультета промышленных биотехнологий и биоинженерии, протокол № 27 от 09 2022 г.

Декан Факультета промышленных биотехнологий и биоинженерии: д-р. биол. наук, доцент Цыганков В.Ю.
Составитель: к.х.н. Жидков М.Е.

Владивосток

2022

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____

(подпись)

(И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____

(подпись)

(И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____

(подпись)

(И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « _____ » _____ 20__ г. № _____

Директор департамента _____

(подпись)

(И.О. Фамилия)

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Методы оптимизации структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачётных единиц / 216 академических часа. Является дисциплиной части ОП, формируемой участниками образовательных отношений, изучается на 2 курсе и завершается экзаменом. Учебным планом предусмотрено проведение лекционных занятий в объеме 32 часов, практических работ в объеме 56 часов, лабораторных работ в объеме 48 часов, а также выделены часы на самостоятельную работу студента - 80 часов (в том числе 36 часов на подготовку к экзамену).

Цели и задачи освоения дисциплины:

Цель изучения данной дисциплины заключается в формировании у обучающихся профессиональных компетенций, необходимых для проведения исследований в области создания новых лекарственных препаратов.

Задачи:

- Сформировать фундаментальные знания о принципах и алгоритмах компьютерного моделирования взаимодействия низкомолекулярных соединений с терапевтическими мишенями, облегчающего оптимизацию БАВ, а также позволяющие оценить вклад отдельных структурных фрагментов молекулы в формирование ее биологической активности.

Для успешного изучения дисциплины «Методы оптимизации структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- ОПК-4 готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к

теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез.

- ОПК -5 способность использования современных информационных технологий для сбора, обработки и распространения научной информации в области биотехнологии и смежных отраслей, способностью использовать базы данных, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее сеть «Интернет») для решения задач.

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие профессиональные компетенции

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
Научно-исследовательский	ПК-1 Способен выполнять эксперименты, оформлять результаты исследований и разработок, планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач	ПК-1.1 Осуществляет выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок	Знает методы выполнения экспериментов
			Умеет оформлять результат исследований и разработок
			Владеет способностью выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок
		ПК-1.2 Готовит элементы документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ	Знает правила оформления документов;
			Умеет составлять программы проведения отдельных этапов работ;
			Владеет навыками планирования программ проведения отдельных этапов работ, оформления документации.

I. Цели и задачи освоения дисциплины:

Цель изучения данной дисциплины заключается в формировании у обучающихся профессиональных компетенций, необходимых для проведения исследований в области создания новых лекарственных препаратов.

Задачи:

- Сформировать фундаментальные знания о принципах и алгоритмах компьютерного моделирования взаимодействия низкомолекулярных соединений с терапевтическими мишенями, облегчающего оптимизацию БАВ, а также позволяющие оценить вклад отдельных структурных фрагментов молекулы в формирование ее биологической активности.

Для успешного изучения дисциплины «Методы оптимизации структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- ОПК-4 готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез.
- ОПК -5 способность использования современных информационных технологий для сбора, обработки и распространения научной информации в области биотехнологии и смежных отраслей, способностью использовать базы данных, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее сеть «Интернет») для решения задач.

В результате изучения данной дисциплины у профессиональные компетенции:

Наименование категории (группы)	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора	Наименование показателя оценивания (результата обучения)
---------------------------------	--------------------------------	-------------------------------	--

компетенций	(результат освоения)	достижения компетенции	по дисциплине)
Научно-исследовательский	ПК-1 Способен выполнять эксперименты, оформлять результаты исследований и разработок, планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач	ПК-1.1 Осуществляет выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок	Знает методы выполнения экспериментов
			Умеет оформлять результат исследований и разработок
			Владеет способностью выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок
		ПК-1.2 Готовит элементы документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ	Знает правила оформления документов;
			Умеет составлять программы проведения отдельных этапов работ;
			Владеет навыками планирования программ проведения отдельных этапов работ, оформления документации.

II. Трудоёмкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачётных единиц (216 академических часа).

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная.

№	Наименование раздела дисциплины	Семестр	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося						Формы промежуточной аттестации
			Лек	Лаб	Пр	ОК	СР	Контроль	
1	Тема 1. Молекулярная механика	4	8	-	-6	-	44	36	
2	Тема 2. Молекулярная динамика		8	24	25				
3	Тема 3. Моделирования взаимодействия рецептор-лиганд		8						

	Тема 4. Современные алгоритмы поиска экстремума нелинейных функций нескольких переменных		8	24	25				
	Итого:		32	48	56		44	36	

III. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лекционные занятия

Тема 1. Молекулярная механика

Определение ММ как способа описания объектов микромира законами классической физики. Функции, применяемые для выражения длин связей, валентных углов, торсионных напряжений, электрических явлений и сил Ван-дер-Ваальса. Силовые поля. Минимизация модели, метод градиентного спуска и метод Ньютона.

Тема 2. Молекулярная динамика

Определение МД как способа моделирования поведения системы частиц – материальных точек. Учет влияния внутренних сил, действующих на частицы. Оценка взаимодействия со средой, температура и термостаты. Второй закон Ньютона в дифференциальной форме и методы численного интегрирования.

Тема 3. Моделирования взаимодействия рецептор-лиганд

Получение пространственной структуры рецептора. Основные виды взаимодействий между лигандом и терапевтической мишенью и их моделирование.

Тема 4. Современные алгоритмы поиска экстремума нелинейных функций нескольких переменных

Статистические методы минимизации (метод Монте-Карло, «simulated annealing»). Методы направленного поиска глобального минимума (генетический алгоритм, метод постепенного конструирования, табу-поиск).

IV. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лабораторные работы

Лабораторная работа № 1. Освоение интерфейса специального программного обеспечения для молекулярного докинга. Подготовка моделей рецептора (5 час.)

Лабораторная работа № 2. Освоение интерфейса специального программного обеспечения для молекулярного докинга. Подготовка моделей лиганда (5 час.)

Лабораторная работа № 3. Освоение интерфейса специального программного обеспечения для молекулярного докинга. Проведение молекулярного докинга на учебной задаче (5 час.)

Лабораторная работа № 4. Освоение интерфейса специального программного обеспечения для молекулярного докинга. Анализ и репрезентация полученных результатов (3 час.)

Практические занятия

Практическое занятие № 1-3. Построение модели рецептора и лиганда для решения практического задания (5 час.)

Практическое занятие № 4-6. Проведение молекулярного докинга между выбранной терапевтической мишенью и лигандом, анализ полученных результатов (5 час.)

Практическое занятие № 4-6. Анализ полученных результатов, установление зависимости структура-активность, оптимизация фармакодинамики выбранного лидирующего соединения (4 час.)

Практическое занятие № 7-9. Оценка возможных направлений метаболизма выбранного соединения. Оптимизация фармакокинетического профиля избранного соединения-лидера (4 час.)

V. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины	Код индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства – наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Раздел 1. Определение биоинженерии; Раздел 2. Генетическая инженерия; Раздел 3. Белковая инженерия.	ПК-1.1 Осуществляет выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок;	Знает методы выполнения экспериментов;	УО-1 собеседование / устный опрос;	
			Умеет оформлять результат исследований и разработок;	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-6 лабораторная работа	
			Владеет способностью выполнять эксперименты и	УО-3 сообщение с презентацией	

			оформлять результаты исследований и разработок		
		ПК-1.2 Готовит элементы документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ	Знает правила оформления документов; отдельных этапов работ;	УО-1 собеседование / устный опрос	
			Умеет составлять программы проведения отдельных этапов работ	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-6 лабораторная работа	
			Владеет навыками планирования программ проведения отдельных этапов работ, оформления документации.	УО-3 сообщение с презентацией	
	Экзамен				УО-1

VI. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Самостоятельная работа определяется как индивидуальная или коллективная учебная деятельность, осуществляемая без непосредственного руководства педагога, но по его заданиям и под его контролем. Самостоятельная работа – это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления студента, его умственных и практических операций и действий зависит и определяется самим студентом.

Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня, что в итоге приводит к развитию навыка самостоятельного планирования и реализации деятельности.

Целью самостоятельной работы студентов является овладение необходимыми компетенциями по своему направлению подготовки, опытом творческой и исследовательской деятельности.

Формы самостоятельной работы студентов:

- работа с основной и дополнительной литературой, Интернет ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- подготовка реферативных обзоров источников периодической печати, опорных конспектов, заранее определенных преподавателем;
- поиск информации по теме, с последующим ее представлением в аудитории в форме доклада, презентаций;
- подготовка к выполнению аудиторных контрольных работ;
- выполнение домашних контрольных работ;
- выполнение тестовых заданий, решение задач;
- составление кроссвордов, схем;
- подготовка сообщений к выступлению на семинаре, конференции;
- заполнение рабочей тетради;
- написание эссе, курсовой работы;
- подготовка к деловым и ролевым играм;
- составление резюме;
- подготовка к зачетам и экзаменам;
- другие виды деятельности, организуемые и осуществляемые образовательным учреждением и органами студенческого самоуправления.

VII. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян.- Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.- 322 с
<https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=chamo:288823&theme=FEFU>

2. The Practice of Medicinal Chemistry (Fourth Edition) / C. G. Wermuth, et al. – Amsterdam : Elsevier, 2015.- 880 p.
<https://www.sciencedirect.com/book/9780124172050/the-practice-of-medicinal-chemistry>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Computational Pharmaceutics: Application of Molecular Modeling in Drug Delivery / D. Ouyang, et al. – New York : John Wiley & Sons, 2015.- 340 p.
<http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-1118573994,subjectCd-CHD0.html>
2. Molecular Diversity and Combinatorial Chemistry Principles and Applications / M. Pirrung – Amsterdam : Elsevier, 2004.- 188 p.
<http://store.elsevier.com/product.jsp?isbn=9780080444932>
3. Neural Computing: Theory and Practice / Ph. D. Wasserman – New York : Van Nostrand Reinhold Company, 1989.- 230 p. <http://pdf-esmanual.com/48746.html>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет»

1. QSAR World [Web source] / Developer : Strand Life Sciences. – Access mode: <http://www.strandls.com/sarchitect/index.html>, free. – the title on the screen

2. Software for molecular modeling [Web source] / Developer : Agile Molecule. – Access mode: <http://www.biomolecular-modeling.com/> , free.
– the title on the screen
3. VEGA ZZ Molecular Modeling Toolkit [Web source] / Developer : Drug Design Laboratory. – Access mode: <http://www.vegazz.net/>, free. –
the title on the screen

Перечень информационных технологий и программного обеспечения

Для проведения практических занятий используется специальное программное обеспечение Vega ZZ, Autodock Vina, Autodock 4 и MGL Tools актуальных версий.

VIII. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Успешное освоение дисциплины предполагает активную работу студентов на всех занятиях аудиторной формы: лекциях и практиках, выполнение аттестационных мероприятий. В процессе изучения дисциплины студенту необходимо ориентироваться на проработку лекционного материала, подготовку к практическим занятиям, (собеседование, презентация), выполнение и защиту практического задания (коллоквиум).

Освоение дисциплины « Методы оптимизации структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования» предполагает рейтинговую систему оценки знаний студентов и предусматривает со стороны преподавателя текущий контроль за посещением студентами лекций, подготовкой и выполнением всех практических заданий, выполнением всех видов самостоятельной работы.

Промежуточной аттестацией по дисциплине «Методы оптимизации

структуры лидирующих соединений: методы компьютерного моделирования» является экзамен.

Студент считается аттестованным по дисциплине при условии выполнения всех видов текущего контроля и самостоятельной работы, предусмотренных учебной программой.

Шкала оценивания сформированности образовательных результатов по дисциплине представлена в фонде оценочных средств (ФОС).

IX. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения о материально-техническом обеспечении ОПОП, включая информацию о наличии оборудованных учебных кабинетов, объектов для проведения практических занятий и самостоятельной работы обучающихся с перечнем основного оборудования, объектов физической культуры и спорта, программного обеспечения представлены в виде таблицы в Справке об МТО.