

Проект

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»

СОГЛАСОВАНО
Ученым советом ИБМХ

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИБМХ

Протокол № ____ от «__»_____2025 г.

(подпись)
м.п.

Е.А. Пономаренко

ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ
«Структурная биоинформатика: AlphaFold3»

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОГРАММЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

1.1. Цель реализации программы дополнительного профессионального образования.

Целью реализации программы является повышение квалификации в структурной вычислительной биологии, совершенствование и формирование новых компетенций, необходимых для профессиональной деятельности, и (или) повышение профессионального уровня в рамках имеющейся квалификации.

1.2. Требования к обучающемуся

Категория слушателей: обучающиеся должны иметь высшее медицинское, фармацевтическое, химическое, физическое, математическое или биологическое образование. Наличие указанного образования должно подтверждаться документом государственного образца.

1.3. Трудоемкость обучения

Срок обучения: 2 месяца 2 недели, 76 часа

Форма обучения: дистанционная

Режим занятий: вт., пт. с 18:00 до 19:30

Выдаваемый документ: удостоверение о повышении квалификации

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

2.1. Характеристика нового вида деятельности, новой квалификации

В результате освоения программы слушатель должен приобрести следующие компетенции:

2.1.1. Универсальные компетенции:

- a. Навыки работы с облачными вычислительными технологиями
- b. Способность выбирать условия проведения эксперимента *in silico* (параметры моделирования)
- c. Способность планировать и осуществлять эксперимент *in silico* для задач структурной биологии с применением ПО AlphaFold 3, GROMACS, PyMOL
- d. Способность оценивать и интерпретировать результаты *in silico* экспериментов в рамках направленности курса
- e. Способность самостоятельно актуализировать знания об изменениях порядка работы в связи с обновлением ПО при помощи официальных источников

2.1.2. Общепрофессиональные компетенции:

- a. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования

2.1.3. Профессиональные компетенции:

а. Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (профилю)

3. СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

3.1. Учебный план

Наименование Темы	Всего по модулю / дисциплине, час.	Аудиторные занятия, час.				Дистанционные занятия, час.				Самостоятельная работа слушателя,	Промежуточ ная аттестация	
		Всего, час.	из них			Всего, час.	из них				Опрос устный	Экзамен
			Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия, семинары		Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия, семинары			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Вводная лекция «Поиск и конструирование новых лекарств с применением методов in silico»	2						2			0		
Вводное занятие: проверка подключения и средств связи. Приветственное слово.	2						2			0		
Платформа аренды вычислительных мощностей Yandex Cloud. Основы, достоинства, недостатки	4								2	2		
Основы удаленного доступа: протоколы RDP и SSH	4								2	2		
Передача файлов на удаленные машины: протоколы SFTP и SCP, утилита winSCP	4								2	2		
Коллоквиум: устный опрос по пройденному материалу	2								2	0	+	

[illegible]

3.2. Календарный учебный график (2022-2023 гг.)

№ п/п	Период обучения	Наименование темы
	2 недели	Модуль 1. Общая компьютерная грамотность
	1 месяц	Модуль 2. Alpha Fold 3
	1 месяц	Модуль 3. Молекулярная динамика

4. УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

4.1. Материально-технические условия реализации программы

4.1.1. Требования к МТО для реализации курса

Аудитория для лекций должна быть оснащена компьютерами с ОС "microsoft windows 10" или "microsoft windows 11» и гарнитурой, или другими устройствами, позволяющими осуществлять двустороннюю голосовую связь, широкополосный выход в Интернет. Доступ к платформе «Яндекс Телемост».

Аудитория для практических работ должна быть оснащена компьютер с ОС "microsoft windows 10" или "microsoft windows 11" и гарнитурой, или другими устройствами, позволяющими осуществлять двустороннюю голосовую связь, широкополосный выход в Интернет, сервер на платформе YandexCloud, соответствующие типу «Intel Broadwell with NVIDIA® Tesla® V100» с 1 GPU, ОС “ubuntu” доступный для подключения по протоколам ssh и sftp и установленным ПО: Gromacs с поддержкой NVIDIA CUDA, htop. Наличие файлов-ключей на компьютере инструктора. Доступ к платформе «Яндекс Телемост».

4.1.2. Требования к МТО для освоения курса со стороны обучающегося

Слушатель должен быть оснащен компьютером с ОС "microsoft windows 10" или "microsoft windows 11" и гарнитурой, или другими устройствами, позволяющими осуществлять двустороннюю голосовую связь, широкополосный выход в Интернет. Необходимо наличие прав администратора на компьютере

обучающегося. Возможно использование ОС, основанных на Debian при наличии у обучающихся root-доступа. В случае возникновения эффекта реверберации, слушатели, использующие колонки, не допускаются на занятия. Доступ к платформе «Яндекс Телемост».

4.2. Учебно-методическое обеспечение программы

4.2.1. Основная литература

Козлова А.С. Згода А.В. Под редакцией Лисицы А. В. Структурная биоинформатика: AlphaFold3 и облачные вычисления. Методическое пособие. - 1 изд. - М.: ИБМХ, 2025

Х.Д.Хельтье, В. Зиппл, Д. Роньян, Г. Фолькерс. Молекулярное моделирование (теория и практика). Под редакцией В.А.Палюлина и Е.В.Радченко М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.- 318 с: ил.- (Медицинская химия). ISBN 978-5-9963-0156-0

4.2.2. Дополнительная литература

Рапапорт Д.К. ; Дьяконова А.Н. (пер. с англ.) ; Ефремов Р.Г. (науч. ред.). — М. ; Ижевск : Ин-т компьютер. исслед., 2012. — 630 с.

Abramson, J., Adler, J., Dunger, J. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. Nature 630, 493–500 (2024).

4.2.3. Электронные ресурсы

GROMACS 2025.3 Manual // zenodo URL: <https://zenodo.org/records/16992569> (дата обращения: 08.09.2025).

5. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Коллоквиумы проходят в формате комбинированного опроса, для сдачи которого, студенту необходимо при помощи полученных в ходе обучения знаний и навыков выполнить практическую задачу. В случае самостоятельного выполнения задачи в полном объеме и без ошибок, влияющих на результат, выставляется оценка «отлично». В случае, если в работе допущены незначительные неточности, или на определенных этапах для выполнения задачи требовалась помощь преподавателя (инструктора), однако полученный результат достоверен, выставляется оценка «хорошо». В случаях, когда задача выполнена частично, но не менее 70%, или выполнена с обращением к личным записям студента (конспектам), однако сохранна достоверность результатов, выставляется оценка «удовлетворительно». В случаях, когда задача не выполнена, или выполнена с искажением результатов, или выполнено менее 70% от объема задачи, или задача выполнена не самостоятельно (списывание), или в случае отсутствия на коллоквиуме без уважительной причины выставляется оценка «неудовлетворительно» и назначается пересдача: не более одного раза в течение двух недель после даты коллоквиума.

6. РАЗРАБОТЧИКИ ПРОГРАММЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Пономаренко Елена Александровна, доктор биологических наук, член-корреспондент РАН

Ромашова Юлия Александровна, кандидат биологических наук

Поройков Владимир Васильевич, доктор биологических наук, академик РАН

Веселовский Александр Владимирович, доктор биологических наук

Лисица Андрей Валерьевич, доктор биологических наук, академик РАН