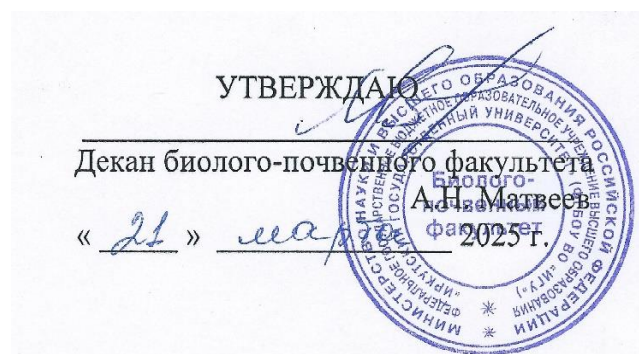




**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
**ФГБОУ ВО «ИГУ»**  
Кафедра физико-химической биологии, биоинженерии и биоинформатики



**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине:

**Б1.В.10 СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ БИОИНФОРМАТИКА**

Специальность: 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика»

Специализация: «Биоинженерия и биоинформатика»

Квалификация выпускника: биоинженер и биоинформатик

Форма обучения: очная с элементами электронного обучения и дистанционных образовательных технологий

Согласовано с УМК биолого-почвенного факультета

Протокол № 5 от 21 марта 2025 г.

Председатель А.Н. Матвеев

Рекомендовано кафедрой физико-химической биологии, биоинженерии и биоинформатики

Протокол № 12 от 19 марта 2025 г.

Зав. кафедрой В.П. Саловарова

Иркутск 2025 г.

## ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Разработан для учебной дисциплины Б1.В.10 «СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ БИОИНФОРМАТИКА», Специализация: «Биоинженерия и биоинформатика». Фонд оценочных материалов (ФОМ) включает оценочные материалы для проведения текущего контроля, промежуточной аттестации в форме экзамена.

Оценочные материалы соотнесены с требуемыми результатами освоения образовательной программы 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика», в соответствии с содержанием рабочей программы учебной дисциплины Б1.В.10 «СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ БИОИНФОРМАТИКА» с учетом ОПОП.

Нормативные документы, регламентирующие разработку ФОМ:

- статья 2, часть 9 Федерального закона «Об образовании в Российской Федерации», ФЗ-273, от 29.12.2012 г.;

- ФГОС ВО по специальности 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика», утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации 12 августа 2020 г. № 973.

### 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины (4 курс, 7 семестр)

**ПК-1:** Способен творчески использовать и применять фундаментальные представления биологии, смежных дисциплин и современные методологические подходы для определения перспективных направлений научных исследований в сфере получения, изучения и применения различных природных, измененных природных биологических объектов, искусственных, организмов а также биомакромолекул, обработку и последующий анализ большого массива информации по биологическим объектам.

**ПК-2:** Способен планировать, организовывать и контролировать проведение исследований, выбирать методы и средства решения поставленных задач, строить математические модели, осваивать новые информационные и программные ресурсы, получать научные результаты с использованием современных методов, оборудования, вычислительных комплексов в области своей профессиональной деятельности, готовить тексты отчетной документации и публикаций.

Компетенции	Индикаторы компетенций	Планируемые результаты обучения	Формы и методы контроля и оценки
ПК-1: Способен творчески использовать и применять фундаментальные представления биологии, смежных дисциплин и современные методологические подходы для определения перспективных направлений научных исследований в сфере получения, изучения и применения различных природных, измененных природных биологических объектов, искусственных, организмов, а также биомакромолекул, обработку и последующий анализ большого массива информации по биологическим объектам.	<i>ИДК ПК-1.1</i> Знает актуальные проблемы, основные открытия в области изучения живых организмов и биологических систем различных уровней организации и способен использовать теоретические знания и умения в научно-исследовательской деятельности	<b>Знать:</b> основные понятия и современные научные достижения в области структурной биоинформатики; <b>Уметь:</b> ориентироваться в существующих методах обработки и последующего анализа большого массива информации; <b>Владеть:</b> навыками приобретения новых знаний и способностью формировать суждения, используя современные образовательные и информационные технологии	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад - тестирование  <b>Промежуточная аттестация:</b> экзамен
	<i>ИДК ПК-1.2</i> Умеет использовать фундаментальные знания и современные методологические подходы для перспективных направлений научных исследований, построения	<b>Знать:</b> основы методов извлечения и анализа информации из расшифрованных последовательностей ДНК организмов. <b>Уметь:</b> - использовать прикладное программное обеспечение для обработки и извлечения информации из	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад, - тестирование  <b>Промежуточная аттестация:</b> экзамен

	информационных моделей и практических разработок в сфере профессиональной деятельности.	расшифрованных последовательностей ДНК организмов <b>Владеть:</b> - навыками использования полученных знаний при проведении исследовательских и аналитических работ	
	<i>ИДК ПК-1.3</i> Владеет навыками творческого применения методологических подходов для разработки моделей, новых технологий, материалов и биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, методов выработки практических рекомендаций для решения задач профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> основные биологические базы данных, содержащие геномную, структурную и другую информацию; <b>Уметь:</b> работать с базами данных, проводить анализ данных с использованием специализированных программ <b>Владеть:</b> способностью использовать базы данных и способностью формировать суждения, исходя из результатов анализа	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад, - тестирование  <b>Промежуточная аттестация:</b> экзамен
ПК-2: Способен планировать, организовывать и контролировать проведение исследований, выбирать методы и средства решения поставленных задач, строить математические модели, осваивать новые информационные и программные ресурсы, получать научные результаты с использованием современных методов, оборудования, вычислительных комплексов в области своей профессиональной деятельности, готовить тексты отчетной документации и публикаций.	<i>ИДК ПК-2.1</i> Знает классические и современные методы исследований, при реализации научных проектов применяет информационные ресурсы и базы данных, методы формализации и решения задач, анализа научных результатов	<b>Знать:</b> информационные ресурсы и базы данных, методы формализации и решения задач, анализа научных результатов <b>Уметь:</b> проводить анализ данных с использованием специализированных программ и применять его для решения поставленных задач; <b>Владеть:</b> навыками совершенствования своих профессиональных качеств в области анализа биологических последовательностей и геномных данных	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад, - тестирование  <b>Промежуточная аттестация:</b> экзамен
	<i>ИДК ПК-2.2</i> Способен профессионально работать с исследовательским, испытательным оборудованием и установками, вычислительными комплексами, специализированными пакетами программ	<b>Знать:</b> основные специализированные пакеты программ; <b>Уметь:</b> работать с вычислительными комплексами, специализированными пакетами программ <b>Владеть:</b> способностью работать с вычислительными комплексами и использовать специализированные пакеты программ в области анализа биологических последовательностей и геномных данных	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад, - тестирование  <b>Промежуточная аттестация:</b> экзамен
	<i>ИДК ПК-2.3</i> Владеет статистическими методами обработки экспериментальных результатов; способен находить и осваивать новые программные ресурсы и применять прикладные компьютерные программные комплексы	<b>Знать:</b> статистические методы обработки экспериментальных результатов; <b>Уметь:</b> находить и осваивать новые программные ресурсы и применять прикладные компьютерные программные комплексы; <b>Владеть:</b> способностью	<b>Текущий контроль:</b> - устный доклад, - тестирование  <b>Промежуточная</b>

	лексы; представлять результаты исследований и разработок в виде отчетов, докладов, публикаций в научных изданиях.	представлять результаты исследований и разработок в виде отчетов, докладов, публикаций в научных изданиях	<b>аттестация:</b> экзамен
--	---	---	----------------------------

## 2. Оценочные материалы для текущего контроля

### 2.1. Устный доклад

*Устный доклад* представляет собой краткий устный аналитический обзор по одной из рекомендуемых тем устных докладов и одобрена преподавателем дисциплины. Студент самостоятельно производит поиск материала для доклада с использованием доступных баз данных научной литературы и поисковых систем. При подготовке доклада студент дополнительно может использовать учебную, специальную и справочную литературу, научные статьи в российских и международных изданиях. Доклад представляется перед аудиторией, включающей преподавателя дисциплины и студентов. Рекомендуемая продолжительность устного выступления студента – 15-20 минут, после которого следуют вопросы аудитории, на которые докладчик должен дать исчерпывающие ответы. Доклад должен сопровождаться наглядным представлением краткого содержания доклада в виде презентации, выполненной с использованием компьютерных программ. Рекомендуется для подготовки презентации использовать программу Microsoft PowerPoint. Задачей доклада в виде устного выступления является получение первичных навыков научно-исследовательской работы, закрепление знаний, полученных при изучении теоретического курса, получение навыков самостоятельного изучения международных источников современной литературы, умения кратко и наглядно представлять результаты исследования, формирование навыков и умений ведения научной дискуссии.

#### Темы устных докладов

1. Информатические подходы, используемые в структурной биоинформатике
2. Инструменты структурной биоинформатики
3. NGS – секвенирование следующего поколения
4. Сравнительное моделирование трехмерных структур из аминокислотной последовательности целевого белка и матрицы с известной структурой
5. Молекулярный докинг
6. Виртуальный скрининг
7. Выбор белков-мишеней
8. Проблема прогнозирования структуры белка
9. Белково-лигандные взаимодействия как основа действия лекарственных средств
10. Структурное выравнивание белков
11. Основные физические методы для анализа пространственного строения биологических макромолекул.
12. Хемоинформатика и молекулярное моделирование

#### Критерии оценивания устного доклада

Оценка доклада осуществляется в соответствии со следующими критериями: степень раскрытия сущности вопроса; четкость изложения основных элементов выбранной темы; умение работать с исследованиями, критической литературой, систематизировать и структурировать материал; умение обобщать, делать выводы, сопоставлять различные точки зрения по изучаемому вопросу (проблеме); владение профессиональной терминологией; умение отвечать на вопросы аудитории.

Критерий	Оцениваемые компетенции	Оценка
----------	-------------------------	--------

Тема раскрыта полностью, проанализировано современное состояние вопроса; студент свободно владеет материалом, излагает его логично, последовательно, лаконично, хорошим научным языком. Доклад сопровождается презентацией, которая составлена с соблюдением общих требований оформления, содержит ссылки на приведенные фото, рисунки, схемы и т.д. При обсуждении студент демонстрирует понимание изучаемой проблемы и методологии научного исследования, владение профессиональной терминологией и умение грамотно отвечать на вопросы аудитории.	ПК-1, ПК-2	отлично
Тема раскрыта, приведено достаточное количество материала, но при этом материал в недостаточной степени проанализирован автором. Имеются недочеты в оформлении презентации или презентация не в полной степени соответствует общим требованиям. Ответы студента на вопросы не являются исчерпывающими и аргументированными.		хорошо
Тема раскрыта не полностью, материал не проанализирован, студент показывает поверхностные знания. Презентация частично соответствует установленным требованиям. При обсуждении доклада студент дает неправильные или исчерпывающие ответы.		удовлетворительно
Тема не раскрыта, приведен скудный объем материала; презентация отсутствует или не соответствует требованиям. При обсуждении доклада студент не дает ответы или они не соответствуют вопросам.		неудовлетворительно

### 3. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации (экзамен)

Промежуточная аттестация проходит в форме экзамена (7 семестр), к которому допускаются студенты, выполнившие в полном объеме аудиторную нагрузку, самостоятельную работу. Студенты, имеющие задолженность, должны выполнить все обязательные виды деятельности. Экзамен проводится в форме тестирования

#### 3.1 Тестирование

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия	Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом		
Вариант 1							
ПК-1:  Способен творчески использовать и применять фундаментальные представления биологии, смежных дисциплин и современные методологические подходы для определения перспективных направлений научных исследований в сфере получения изучения и применения различных природных, измененных биологических объектов, искусственных, организмов, а также биомакромолекул, обработку и последующий анализ большого массива информации по биологическим объектам.	ИДК ПК-1.1  Знать актуальные проблемы, основные открытия в области изучения живых организмов и биологических систем различных уровней организации и способен использовать теоретические знания и умения в научно-исследовательской деятельности	<b>Задание 1</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Установите соответствие между типами вторичной структуры белка и их характеристиками:</b>	<b>Задание 2</b> <i>Прочитайте вопрос и расположите этапы моделирования структуры белка методом гомологии в правильной последовательности:</i>  1.Сборка модели (моделирование петлевых участков и оптимизации геометрии).  2.Поиск шаблона (идентификация белка с известной структурой, гомологичного целевому). 3.Выравнивание последовательностей (выравнивание последовательности целевого белка с последовательностью шаблона). 4.Построение каркаса (перенос координат атомов консервативных участков с шаблона на целевой белок). 5.Оценка качества модели (верификация и оценка стереохимических параметров полученной модели).  <b>Правильный ответ:</b> 2, 3, 4, 1, 5.	<b>Задание 3</b> <i>Прочитайте вопрос, выберите правильный вариант ответа и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответа:</i>  Какие из перечисленных методов наиболее эффективно используются для предсказания вторичной структуры белка de novo (без использования гомологов)? а)Сравнительное моделирование (Homology Modeling) б)Методы, основанные на гидропатии (Hydropathy Plots) в)Методы ab initio (From Scratch) г)Выравнивание последовательностей (Sequence Alignment)  <b>Правильный ответ:</b> в)Методы ab initio (From Scratch)  Аргументация: Методы ab initio специально разработаны для предсказания структуры на основе только аминокислотной последовательности, без обращения к известным структурам гомологов. Сравнительное моделирование требует наличия гомологов с известной структурой. Методы, основанные на гидропатии, могут	<b>Задание 4</b> <i>Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ</i>  Опишите, как методы машинного обучения (МО) применяются в структурно-функциональной биоинформатике. Приведите примеры успешного использования МО для решения конкретных задач.  Эталонный ответ: Методы машинного обучения (МО) стали незаменимым инструментом в структурно-функциональной биоинформатике, позволяя решать широкий спектр задач, которые сложно или невозможно решить с помощью традиционных методов. МО позволяет строить модели на основе больших объемов данных, извлекать закономерности и делать прогнозы. Например, МО широко используется для предсказания вторичной и третичной структуры белка. Алгоритмы, такие, как AlphaFold и RosettaFold, используют методы глубокого обучения для предсказания структуры белка на основе его аминокислотной последовательности с высокой точностью. Эти алгоритмы анализируют закономерности в известных структурах белков и используют эту информацию для предсказания структуры новых белков.		
						Вторичная структура	Характеристика
						1. Альфа-спираль	А. Боковые цепи аминокислот направлены наружу от оси спирали.
						2. Бета-лист	Б. Образуется за счет водородных связей между аминокислотами, расположенными рядом друг с другом по цепи.
						3. Петля	В. Состоит из нескольких бета-цепей, соединенных водородными связями.
	Г. Соединяет элементы вторичной структуры, часто содержат глицин и пролин.						
<b>Правильные ответы:</b>							

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия	Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом										
		1-А, 2-В, 3-Г		указывать на трансмембранные участки, но не предоставляют детальную вторичную структуру. Выравнивание последовательнос тей используется для поиска гомологов и не является методом предсказания структуры de novo.											
	ИДК ПК 1.2  Умеет использовать фундаментальные знания и современные методологические подходы для перспективных направлений научных исследований, построения информационных моделей и практических разработок в сфере профессиональной деятельности.	<b>Задание 5</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Установите соответствие между типами белковых доменов и их функциями:</b> <table><tr><th>Домен</th><th>Функция</th></tr><tr><td>1. SH2</td><td>А. Связывание ДНК</td></tr><tr><td>2. Kinase</td><td>Б. Фосфорили - рование белков</td></tr><tr><td>3. Zinc finger</td><td>В. Связывание фосфорилирован ных тирозино вых остатков</td></tr><tr><td></td><td>Г. Катализ гидролиза АТФ</td></tr></table> <b>Правильные ответы:</b> 1-В, 2-Б, 3-А	Домен	Функция	1. SH2	А. Связывание ДНК	2. Kinase	Б. Фосфорили - рование белков	3. Zinc finger	В. Связывание фосфорилирован ных тирозино вых остатков		Г. Катализ гидролиза АТФ	<b>Задание 6</b> <i>Прочитайте вопрос и расположите этапы анализа результатов молекулярного докинга «лиганд-белок» в правильной пследовательности:</i> 1.Визуализация полученных комплексов и оценка характера взаимодействий. 2.Выбор лиганда и структуры белка-мишени. 3.Кластеризация полученных поз лиганда и выбор наиболее вероятной позы. 4.Проведение молекулярного докинга. 5.Оценка энергии связывания лиганда с белком.  <b>Правильный ответ:</b> 2, 4, 3, 5, 1.	<b>Задание 7</b> <i>Прочитайте вопрос, выберите правильный вариант ответа и запишите аргументы, обосно вывающие выбор ответа:</i>  Для чего чаще всего используется анализ докинга (Molecular Docking) в структурной биоинформатике? а) Для определения первичной структуры белка б) Для предсказания взаимодействия между белком и лигандом в) Для визуализации белковых структур г) Для выравнивания последовательностей ДНК.  <b>Правильный ответ:</b> б) Для предсказания взаимодействия между белком и лигандом	<b>Задание 8</b> <i>Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ</i>  Объясните концепцию «белковых доменов» и их роль в определении функции белка. Как идентифицируются и классифицируются белковые домены?  Эталонный ответ: Белковые домены – это структурно и функционально независимые единицы в составе белка. Многие белки состоят из нескольких доменов, каждый из которых может выполнять определенную функцию, такую, как связывание с ДНК, связывание с другими белками или каталитическая активность. Наличие нескольких доменов позволяет белкам выполнять сложные функции и взаимодействовать с различными молекулами. Домены часто эволюционируют независимо друг от друга, что приводит к их повторному использованию в разных белках и в разных
Домен	Функция														
1. SH2	А. Связывание ДНК														
2. Kinase	Б. Фосфорили - рование белков														
3. Zinc finger	В. Связывание фосфорилирован ных тирозино вых остатков														
	Г. Катализ гидролиза АТФ														

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия	Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом					
				Аргументация: Молекулярный докинг – это метод, который позволяет предсказать, как лиганд (например, лекарственное вещество) связывается с целевым белком, определяя предпочтительное положение и аффинность связывания. Он используется для изучения взаимодействия белок-лиганд, предсказания аффинности и оценки конформационных изменений. Определение первичной структуры белка требует других методов (например, масс-спектрометрии). Визуализация белковых структур – это отдельная задача, хотя докинг может предоставить структуры комплексов для визуализации. Выравнивание последовательностей ДНК относится к другой области биоинформатики.	организмах. Это позволяет белкам приобретать новые функции путем комбинирования существующих доменов. Белковые домены идентифицируются и классифицируются на основе сходства последовательностей и структур. Существуют базы данных доменов, такие как Pfam, InterPro и SCOP/CATH, которые содержат информацию о известных доменах и алгоритмы для их идентификации в новых последовательностях. Эти алгоритмы используют методы профильного анализа, Hidden Markov Models (HMMs) и структурные сравнения для выявления доменов.					
	<i>ИДК ПК-1.3</i>  Владеет навыками творческого применения методологических подходов для разработки моделей, новых технологий, материалов и биологических объектов с целенаправленно измененными свойствами, методов выработки практических рекомендаций для решения задач	<b>Задание 9</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Установите соответствие между методами предсказания структуры белка и их принципами</b> <table><tr><th>Метод</th><th>Принцип</th></tr><tr><td>1. Гомологичное моделирование</td><td>А. Поиск известных структур, имеющих схожую последовательность с целевым белком, и построение модели на их основе.</td></tr><tr><td>2. Предсказание <i>de novo</i></td><td>Б. Использование физических и химических</td></tr></table>	Метод	Принцип	1. Гомологичное моделирование	А. Поиск известных структур, имеющих схожую последовательность с целевым белком, и построение модели на их основе.	2. Предсказание <i>de novo</i>	Б. Использование физических и химических	<b>Задание 10</b> <i>Прочитайте вопрос и расположите этапы предсказания функций белка на основе анализа его структуры в правильной последовательности:</i> 1.Сравнение структуры белка с известными структурами в базах данных (например, PDB). 2. Анализ сайтов связывания лиганда и предсказание потенциальных лигандов. 3.Предсказание доменов и мотивов в структуре белка. 4.Функциональная аннотация на основе структурного сходства. 5.Оценка эволюционной консервативности остатков в активном сайте.  <b>Правильный ответ:</b>	<b>Задание 11</b> Что такое мотив белка (Protein Motif) и почему важно его идентифицировать? а) полная трехмерная структура белка. б) Короткий консервативный участок аминокислотной последовательности, связанный с определенной функцией. в) Участок белка, связывающийся с ДНК. г) Последовательность аминокислот, которая всегда встречается в одном и том же белке.  <b>Правильный ответ:</b> б) Короткий консервативный участок аминокислотной последовательности, связанный с определенной функцией.  Аргументация:
Метод	Принцип									
1. Гомологичное моделирование	А. Поиск известных структур, имеющих схожую последовательность с целевым белком, и построение модели на их основе.									
2. Предсказание <i>de novo</i>	Б. Использование физических и химических									



Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия		Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом								
	профессиональной деятельности		принципов для определения наиболее стабильной структуры белка.	3, 1, 2, 5, 4.	Мотив белка – это короткий участок аминокислотной последовательности, который характеризуется высокой степенью консервативности и часто связан с определенной биологической функцией или структурным элементом. Идентификация мотивов важна, поскольку она позволяет предсказывать функцию белка на основе его последовательности, даже если полная структура неизвестна. Мотив не является полной трехмерной структурой, хотя и может формировать определенную структуру. Связь с ДНК – это только одна из возможных функций мотивов. И, конечно, мотивы могут встречаться в разных белках, а не только в одном.	«дышит» - то есть, как меняется его структура в динамике, открывая и закрывая активные центры или участки связывания. Это особенно важно для белков, которые претерпевают значительные конформационные изменения при выполнении своей функции. С помощью МД можно изучать связывание лиганда с белком, определять энергию связывания, выявлять ключевые аминокислоты, участвующие в связывании, и анализировать влияние мутаций на связывание. МД также позволяет моделировать сложные процессы, такие как сворачивание белка (проблему предсказания структуры белка de novo), агрегацию белков и транспорт молекул через клеточные мембраны.								
		3. Распознавание нити (threading)	В. Поиск соответствия между последовательностью целевого белка и известными структурами, даже при низком сходстве последовательностей.											
			Г. Экспериментальное определение структуры белка с использованием рентгеновской кристаллографии.											
		Правильные ответы: 1-А, 2-Б, 3-В												
ПК-2:  Способен планировать, организовывать и контролировать проведение исследований, выбирать методы и средства решения поставленных задач, строить математические модели, осваивать новые информационные и программные ресурсы, получать научные результаты с использованием современных методов, оборудования, вычислительных комплексов в области	ИДК ПК-2.1  Знает классические и современные методы исследований, при реализации научных проектов применяет информационные ресурсы и базы данных, методы формализации и решения задач, анализа научных результатов	<b>Задание 13</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Установите соответствие между базами данных и типами содержащихся в них данных:</b> <table><tr><th>База данных</th><th>Тип данных</th></tr><tr><td>1. PDB</td><td>А. Последовательности нуклеотидов и аминокислот</td></tr><tr><td>2. UniProt</td><td>Б. Трехмерные структуры белков и нуклеиновых кислот</td></tr><tr><td>3. GO</td><td>В. Информация о функциях генов и белков, представленная в виде онтологии.</td></tr></table>		База данных	Тип данных	1. PDB	А. Последовательности нуклеотидов и аминокислот	2. UniProt	Б. Трехмерные структуры белков и нуклеиновых кислот	3. GO	В. Информация о функциях генов и белков, представленная в виде онтологии.	<b>Задание 14</b> <i>Прочитайте вопрос и установите правильную последовательность шагов при проведении анализа дифференциальной экспрессии генов с использованием RNA- seq:</i> 1.Нормализация данных (корректировка различий в глубине секвенирования между образцами). 2.Построение библиотеки К ДНК и секвенирование. 3.Сопоставление ридов с геномом (mapping). 4.Определение уровня экспрессии генов (подсчет количества ридов, соответствующих каждому гену).	<b>Задание 15</b> <i>Прочитайте вопрос, выберите правильный вариант ответа и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответа:</i>  Какой метод наиболее подходит для выявления консервативных участков в семействе белков, что важно для определения ключевых функциональных остатков?  а) BLAST поиск б) Анализ филогенетического дерева в) Множественное выравнивание последовательностей г) Предсказание вторичной структуры  <b>Правильный ответ:</b>	<b>Задание 16</b> <i>Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ</i>  Опишите роль гомологичного моделирования в предсказании структуры белка. Каковы ограничения этого метода и как можно повысить точность модели?  Эталонный ответ: Гомологичное моделирование – это метод предсказания трехмерной структуры белка на основе его аминокислотной последовательности и структуры гомологичного белка (белка с высокой степенью сходства последовательностей), структура которого уже известна (шаблон). Этот метод основан на принципе, что сходные последовательности обычно обладают сходными структурами. Процесс гомологичного моделирования вклю
База данных	Тип данных													
1. PDB	А. Последовательности нуклеотидов и аминокислот													
2. UniProt	Б. Трехмерные структуры белков и нуклеиновых кислот													
3. GO	В. Информация о функциях генов и белков, представленная в виде онтологии.													

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия		Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом
своей профессиональной деятельности, готовить тексты отчетной документации и публикаций.			Г. Данные о метаболических путях и ферментативных реакциях.	Статистический анализ (определение генов, экспрессия которых значительно отличается между группами образцов).  <b>Правильный ответ:</b> 2, 3, 4, 1, 5	в) Множественное выравнивание последовательностей. Аргументация: Множественное выравнивание последовательностей позволяет одновременно сравнивать несколько последовательностей белков из одного семейства, выявляя участки с высокой степенью консервативности. Эти консервативные участки часто соответствуют функционально важным доменам или активным центрам. BLAST используется для поиска сходных последовательностей в базах данных, но не для анализа консервации внутри семейства. Анализ филогенетического дерева показывает эволюционные взаимосвязи между белками, но не акцентирует внимание на консервативных участках. Предсказание вторичной структуры предоставляет информацию о локальных структурных элементах, но не о функциональных остатках.	часть в себя выравнивание последовательности целевого белка с последовательностью шаблона, построение модели на основе структуры шаблона (с использованием программы для молекулярного моделирования), доработку модели (удаление стерических конфликтов, оптимизация геометрии) и оценку качества модели. Основное ограничение гомологичного моделирования – это зависимость от наличия подходящего шаблона. Чем ниже сходство последовательностей между целевым белком и шаблоном, тем ниже точность модели. Другие ограничения связаны с точностью выравнивания последовательностей и способностью моделировать петли (регионы, не имеющие гомологов в шаблоне). Для повышения точности модели можно использовать несколько шаблонов, улучшать выравнивание последовательностей с использованием более продвинутых алгоритмов, использовать методы оптимизации структуры (например, молекулярную динамику) и проводить оценку качества модели с помощью различных критериев (например, Ramachandran plot, GA341 score).
	ИДК ПК 2.2  Способен профессионально работать с исследовательским, испытательным оборудованием и установками, вычислительными комплексами,	<b>Задание 17</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Установите соответствие между типами молекулярного докинга и их целями:</b>		<b>Задание 18</b> <i>Прочитайте вопрос и расположите этапы предсказания функций белка на основе анализа его структуры в правильной последовательности:</i> 1. Сравнение структуры белка с известными структурами в базах	<b>Задание 19</b> <i>Прочитайте вопрос, выберите правильный вариант ответа и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответа:</i>  Какой из следующих факторов в наибольшей степени влияет на стабильность трехмерной структуры белка? а) Наличие дисульфидных связей б) Гидрофобный эффект	<b>Задание 20</b> <i>Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ</i>  Опишите, каким образом данные о трехмерной структуре белка помогают предсказать его функцию. Приведите конкретные примеры.  Эталонный ответ: Знание трехмерной структуры белка играет критическую роль в предсказании его функции, поскольку функция белка тесно связана с его формой и доступ
		Тип докинга	Цель			
		1. Докинг	А. Предсказание			

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия		Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом
	специализированными пакетами программ	лиганда	сайта связывания белка с другим белком.	данных (например, PDB). 2.Анализ сайтов связывания лиганда и предсказание потенциальных лигандов. 3.Предсказание доменов и мотивов в структуре белка. 4.Функциональная аннотация на основе структурного сходства. 5.Оценка эволюционной консервативности остатков в активном сайте.  <b>Правильный ответ:</b> 3, 1, 2, 5, 4	в) Количество альфа-спиралей г) Концентрация соли в растворе  <b>Правильный ответ:</b> б) Гидрофобный эффект. Аргументация: Гидрофобный эффект, заключающийся в стремлении гидрофобных аминокислот спрятаться внутри белковой глобулы, является одним из основных факторов, определяющих стабильность белковой структуры. Дисульфидные связи стабилизируют структуру, но их наличие не является определяющим для всех белков. Количество альфа-спиралей влияет на общую организацию, но не является ключевым фактором стабильности. Концентрация соли может влиять на взаимодействие белка с растворителем и другими белками, но не оказывает такого существенного влияния на стабильность, как гидрофобный эффект.	ностью определенных участков для взаимодействия с другими молекулами. Структура определяет активный центр фермента, участки связывания с лигандами, участки взаимодействия с другими белками и участки, отвечающие за локализацию белка в клетке. Например, анализ структуры фермента позволяет идентифицировать ключевые аминокислотные остатки в активном центре, которые катализируют определенную реакцию. Сравнивая структуру фермента с известными ферментами с похожей структурой активного центра, можно предсказать его субстратную специфичность и механизм действия. Другой пример: анализ структуры белка, взаимодействующего с ДНК, может выявить мотивы связывания с ДНК, такие как спираль-поворот-спираль или цинковый палец. Основываясь на структуре этих мотивов и их ориентации, можно предсказать конкретные последовательности ДНК, с которыми белок будет связываться, и, следовательно, регулируемые им гены.
		2. Докинг белок-белок	Б. Предсказание конформации небольшого лиганда в активном сайте белка.			
		3. Виртуальный скрининг	В. Отбор перспективных соединений для тестирования их биологической активности.			
			Г. Определение стабильности белковой структуры в зависимости от pH среды.			
		<b>Правильный ответ:</b> 1-Б, 2-А, 3-В				
	ИДК ПК 2.3  Владеет статистическими методами обработки экспериментальных результатов; способен находить и осваивать новые программные ресурсы и применять прикладные компьютерные программные комп	<b>Задание 21</b> <i>Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, выберите соответствующую позицию из правого столбца:</i> <b>Сопоставьте базу данных с типом содержащейся информации</b>		<b>Задание 22</b> <i>Прочитайте вопрос и расположите этапы определения структуры белка методом рентгеновской кристаллографии в правильной последовательности:</i> 1.Решение фазовой проблемы. 2.Получение кристаллов белка. 3.Сбор данных дифракции рентгеновских лучей. 4.Построение и уточне	<b>Задание 23</b> <i>Прочитайте вопрос, выберите правильный вариант ответа и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответа:</i>  Какую информацию можно получить из базы данных Protein Data Bank (PDB)? А) Последовательности нуклеотидов В) Трехмерные структуры белков, нуклеиновых кислот и их комплексов С) Аннотированные	<b>Задание 24</b> <i>Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ</i>  Поясните, как методы машинного обучения и искусственного интеллекта используются в структурной биоинформатике.  Эталонный ответ: Методы машинного обучения и искусственного интеллекта (ИИ) все шире используются в структурной биоинформатике для решения сложных задач: •Предсказание структуры белка: AlphaFold и
		База данных	Тип информации			
		A. PDB	1. Последовательности нуклеиновых кислот			
		B. UniProt	2. Трехмерные			

Компетенция	Индикаторы компетенции (Тема курса)	Задание закрытого типа на установление соответствия		Задание закрытого типа на установление последовательности	Задание комбинированного типа (Выбор ответа + аргументация)	Задание открытого типа с развернутым ответом
	лексы; представлять результаты исследований и разработок в виде отчетов, докладов, публикаций в научных изданиях		структуры белков	ние модели структуры.  <b>Правильный ответ:</b> 2, 3, 1, 4	последовательности белков с информацией о функциях D) Данные о генетической изменчивости популяций  <b>Правильный ответ:</b> В) Трехмерные структуры белков, нуклеиновых кислот и их комплексов Аргументация: PDB является основным репозиторием для экспериментально определенных трехмерных структур биологических макромолекул, полученных методами рентгеновской кристаллографии, ЯМР-спектроскопии и криоэлектронной микроскопии.	RoseTTAFold – примеры успешного применения глубокого обучения для предсказания структуры белка с высокой точностью. •Предсказание вторичной структуры: Алгоритмы машинного обучения используются для предсказания вторичной структуры белка на основе его аминокислотной последовательности. •Предсказание функций белка: Машинное обучение используется для предсказания функций белка на основе его структуры или последовательности. •Молекулярный докинг: Машинное обучение может улучшить точность скоринговых функций в молекулярном докинге. •Анализ молекулярной динамики: Машинное обучение может помочь в анализе больших объемов данных, полученных в результате молекулярно-динамического моделирования. •Дизайн белков: Генеративные модели машинного обучения используются для дизайна новых белков с желаемыми свойствами.
		C. GenBank	3. Аннотированные последовательности белков			
		<b>Правильный ответ:</b> А-2, В-3, С-1				

## Критерии оценки результатов тестирования

№	Тип задания	Критерии оценки	Результат оценивания
1	Задание закрытого типа на установление соответствия	Считается верным, если правильно установлены все соответствия (позиции одного столбца верно соотнесены с позициями другого столбца)	Полное совпадение с верным ответом – 1 балл Все остальные случаи – 0 баллов
2	Задание закрытого типа на установление последовательности	Считается верным, если правильно указана вся последовательность цифр	Полное совпадение с верным ответом – 1 балл Все остальные случаи – 0 баллов
3	Задание комбинированного типа с выбором одного верного ответа из четырех предложенных и обоснованием выбора	Считается верным, если правильно указана цифра (буква) правильного ответа и приведены корректные аргументы, используемые при выборе ответа	Полное совпадение с верным ответом – 1 балл Все остальные случаи – 0 баллов
4	Задание комбинированного типа с выбором нескольких верных ответов из четырех предложенных и обоснованием выбора	Считается верным, если правильно указаны цифры (буквы) правильного ответа и приведены корректные аргументы, используемые при выборе ответа	Полное совпадение с верным ответом – 1 балл Все остальные случаи – 0 баллов
5	Задание открытого типа с развернутым ответом	Считается верным, если ответ совпадает с эталонным ответом по содержанию и полноте	Полное соответствие эталонному ответу – 1 балл Все остальные случаи – 0 баллов

Процент результативности	Оцениваемые компетенции	Оценка	
		Балл (отметка)	Вербальный аналог
91 % - 100 %	ПК-1, ПК-2	5	отлично
71 % - 90 %		4	хорошо
51 % - 70 %		3	удовлетворительно
0 % - 50 %		2	неудовлетворительно

## Задания для тестирования

### I. Задания на установление соответствия

#### Задание 1

Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, подберите соответствующую позицию из правого столбца:

**Сопоставьте уровень организации белковой молекулы с её характеристикой:**

Уровень организации	Характеристика
А. Первичная	1. Трехмерная структура, определяемая взаимодействиями между радикалами аминокислот
В. Вторичная	2. Линейная последовательность аминокислот
С. Третичная	3. Локальные повторяющиеся структуры (альфа-спирали, бета-

	листы)
D. Четвертичная	4. Объединение нескольких полипептидных цепей в единый комплекс

Запишите выбранные цифры под соответствующими буквами:

A	B	C	D

Правильные ответы

A	B	C	D
2	3	1	4

## Задание 2

Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, подберите соответствующую позицию из правого столбца:

**Сопоставьте тип взаимодействия с его ролью в стабилизации структуры белка:**

Тип взаимодействия	Роль
A. Водородные связи	1. Гидрофобное ядро белка
B. Ван-дер-ваальсовы силы	2. Взаимодействие между заряженными аминокислотами
C. Гидрофобные взаимодействия	3. Участие в формировании альфа-спиралей и бета-листов
D. Ионные связи	4. Слабые, но многочисленные взаимодействия, обеспечивающие плотную упаковку

Запишите выбранные цифры под соответствующими буквами:

A	B	C	D

Правильные ответы

A	B	C	D
3	4	1	2

## Задание 3

Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, подберите соответствующую позицию из правого столбца:

**Сопоставьте класс ферментов с типом катализируемой реакции:**

Класс ферментов	Тип реакции
A. Оксидоредуктазы	1. Перенос функциональной группы
B. Трансферазы	2. Реакции окисления-восстановления
C. Гидролазы	3. Разрыв связей с участием воды
D. Изомеразы	4. Превращение молекулы в её изомер

Запишите выбранные цифры под соответствующими буквами:

A	B	C	D

Правильные ответы

A	B	C	D
2	1	3	4

#### Задание 4

Прочитайте вопрос и к каждой позиции, данной в левом столбце, подберите соответствующую позицию из правого столбца:

**Сопоставьте программное обеспечение с его применением в биоинформатике:**

Программное обеспечение	Применение
A. PyMOL	1. Молекулярная динамика
B. BLAST	2. Визуализация и анализ структуры белка
C. GROMACS	3. Поиск гомологичных последовательностей

Запишите выбранные цифры под соответствующими буквами:

A	B	C

Правильные ответы

A	B	C
2	3	1

#### Задания на установление последовательности

#### Задание 5

Прочитайте вопрос и расположите этапы моделирования белка методом гомологичного моделирования в правильной последовательности:

1. Построение модели на основе шаблона.
2. Выравнивание последовательности целевого белка и белка-шаблона.
3. Поиск белка-шаблона с известной структурой.
4. Оценка и оптимизация построенной модели.

Ответ

--	--	--	--

Правильный ответ

3	2	1	4
---	---	---	---

#### Задание 6

Прочитайте вопрос и расположите этапы предсказания вторичной структуры белка в правильной последовательности:

1. Анализ предсказанной вторичной структуры и поиск мотивов.
2. Применение алгоритма предсказания вторичной структуры (например, PSIPRED).
3. Подготовка последовательности белка в формате, необходимом для программы предсказания.
4. Оценка достоверности предсказания.

Ответ

--	--	--	--

Правильный ответ

3	2	4	1

#### Задание 7

Прочитайте вопрос и расположите этапы проведения молекулярно-динамического моделирования в правильной последовательности:

1. Анализ траектории и извлечение данных.
2. Подготовка системы (добавление растворителя, ионов).

3. Минимизация энергии системы.
4. Запуск симуляции.

Ответ

--	--	--	--

**Правильный ответ**

2	3	4	1
---	---	---	---

### Задание 8

Прочитайте вопрос и расположите шаги анализа структуры белка для предсказания его функции:

1. Поиск структурно-связанных мотивов.
2. Анализ активного центра и сайтов связывания.
3. Идентификация известных структурных доменов.
4. Сравнение структуры с известными белками.

Ответ

--	--	--	--

**Правильный ответ**

3	4	2	1
---	---	---	---

### Задание 9

Прочитайте вопрос и расположите шаги анализа структуры белка для предсказания его функции в правильной последовательности:

1. Поиск структурно-связанных мотивов.
2. Анализ активного центра и сайтов связывания.
3. Идентификация известных структурных доменов.
4. Сравнение структуры с известными белками.

Ответ

--	--	--	--

**Правильный ответ**

3	4	2	1
---	---	---	---

### Задание 10

Прочитайте вопрос и расположите этапы анализа результатов поиска гомологов с помощью BLAST в правильной последовательности:

1. Оценка значимости найденных совпадений (E-value, bit score).
2. Выполнение BLAST-поиска с целевой последовательностью.
3. Анализ найденных последовательностей и их аннотаций.
4. Выбор наиболее релевантных гомологов.

Ответ

--	--	--	--

**Правильный ответ**

2	1	4	3
---	---	---	---



## Задания комбинированного типа (выбор ответа с аргументацией)

### Задание 11

Внимательно прочитайте вопрос и выберите все возможные варианты ответа, обоснуйте свой выбор:

Какой уровень организации белка наиболее важен для его биологической функции?

- А) Первичная структура
- В) Вторичная структура
- С) Третичная структура
- Д) Четвертичная структура

Выберите один вариант ответа и аргументируйте свой выбор.

**Правильный ответ:** С) Третичная структура

Аргументация: Третичная структура определяет трехмерную конформацию белка, включая расположение активного центра и участков связывания с другими молекулами. Именно эта пространственная организация напрямую определяет способность белка взаимодействовать с другими молекулами и выполнять свою биологическую функцию. Первичная структура определяет последовательность аминокислот, но сама по себе не определяет функцию. Вторичная структура формирует локальные элементы, а четвертичная относится только к белкам, состоящим из нескольких субъединиц.

### Задание 12

Внимательно прочитайте вопрос и выберите все возможные варианты ответа, обоснуйте свой выбор:

Какой метод предсказания структуры белка наиболее подходит, если у вас есть последовательность белка, но нет известных гомологов с установленной структурой?

- А) Гомологичное моделирование
- В) Threading
- С) Ab initio (de novo)
- Д) Все перечисленные методы одинаково подходят

Выберите один вариант ответа и аргументируйте свой выбор.

**Правильный ответ:** С) Ab initio (de novo)

Аргументация: Гомологичное моделирование и threading требуют наличия белка-шаблона (гомолога с известной структурой). Если таких гомологов нет, то ab initio методы, основанные на физических принципах и статистических закономерностях, являются единственным способом предсказать структуру белка с нуля.

### Задание 13

Внимательно прочитайте вопрос и выберите все возможные варианты ответа, обоснуйте свой выбор:

Что такое E-value в контексте BLAST-поиска?

- А) Длина выравнивания между двумя последовательностями
- В) Процент идентичности между двумя последовательностями
- С) Ожидаемое количество случайных совпадений с данной или лучшей степенью схожести
- Д) Вероятность того, что выравнивание является биологически значимым

Выберите один вариант ответа и аргументируйте свой выбор.

Ответ \_\_\_\_\_

Правильный ответ: С) Ожидаемое количество случайных совпадений с данной или лучшей степенью схожести

Аргументация: E-value указывает на статистическую значимость найденного соответствия. Чем меньше E-value, тем меньше вероятность того, что соответствие является случайным, и тем выше вероятность, что оно имеет биологическую значимость.

#### Задание 14

Внимательно прочитайте вопрос и выберите все возможные варианты ответа, обоснуйте свой выбор:

Какие силы в основном ответственны за формирование гидрофобного ядра в структуре белка?

- A) Водородные связи
- B) Ионные связи
- C) Ван-дер-ваальсовы силы
- D) Гидрофобные взаимодействия

Выберите один вариант ответа и аргументируйте свой выбор.

Ответ \_\_\_\_\_

Правильный ответ: D) Гидрофобные взаимодействия

Аргументация: Гидрофобные аминокислоты стремятся избежать контакта с водой и собираются вместе в центре белка, формируя гидрофобное ядро. Это происходит за счет гидрофобных взаимодействий, которые выталкивают воду и стабилизируют структуру белка.

#### Задания открытого типа с развернутым ответом

#### Задание 15

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Опишите процесс молекулярного докинга. Какие факторы влияют на точность и надежность результатов докинга?

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

Молекулярный докинг — это метод вычислительной биоинформатики, используемый для предсказания наиболее вероятной ориентации лиганда (например, лекарства) при связывании с белком-рецептором и оценки энергии связывания. Процесс включает в себя:

1. Подготовка структуры рецептора и лиганда: Очистка структуры от воды и других молекул, добавление атомов водорода, определение зарядов.
2. Определение активного центра: Идентификация участка связывания на белке.
3. Генерация конформаций лиганда: Докинг-программа генерирует множество возможных конформаций лиганда в активном центре.
4. Оценка энергии связывания (скоринг): Каждая конформация оценивается с использованием скоринговой функции, которая учитывает различные взаимодействия (ван-дер-ваальсовы, электростатические, гидрофобные).
5. Ранжирование и анализ результатов: Лучшие конформации ранжируются по энергии связывания и анализируются для выявления ключевых взаимодействий.

На точность и надежность результатов докинга влияют:

- Качество структуры рецептора: Высокое разрешение структуры улучшает точность докинга.
- Точность скоринговой функции: Не все скоринговые функции одинаково точны, и выбор подходящей функции критичен.
- Гибкость рецептора и лиганда: Учет гибкости рецептора и лиганда (например, с помощью молекулярной динамики) может улучшить результаты докинга.
- Параметры докинга: Правильная настройка параметров докинга (например, размер сетки, количество поколений) важна для получения надежных результатов.

#### Задание 16

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Объясните концепцию структурных доменов в белках и их роль в эволюции и функционировании белков.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

Структурные домены – это компактные, глобулярные единицы в структуре белка, которые обычно сворачиваются независимо и выполняют определенную функцию. Домены часто встречаются в разных белках и являются модульными строительными блоками, которые могут комбинироваться для создания новых белков с новыми функциями.

Роль структурных доменов:

- Эволюция белков: Домены могут дублироваться, перемещаться и рекомбинироваться в процессе эволюции, приводя к появлению новых белков с новыми комбинациями функций.
- Функциональность: Каждый домен может выполнять определенную функцию, такую как связывание с лигандом, катализ или взаимодействие с другими белками.
- Стабильность белка: Домены способствуют стабильности белка, так как каждый домен сворачивается независимо и может стабилизировать другие домены.
- Модульность: Домены позволяют белкам выполнять несколько функций одновременно или адаптироваться к различным условиям, изменяя взаимодействие между доменами.

### Задание 17

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Опишите процесс гомологичного моделирования белка. Какие факторы определяют качество полученной модели? Как можно оценить качество модели?

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

Гомологичное моделирование – это метод предсказания структуры белка на основе известной структуры гомолога (шаблона). Процесс включает в себя:

1. Поиск шаблона: Идентификация белка с известной структурой, имеющего сходную последовательность с целевым белком.
2. Выравнивание последовательностей: Выравнивание последовательностей целевого белка и шаблона.
3. Построение модели: Создание трехмерной модели целевого белка на основе структуры шаблона, с учетом различий в последовательности.
4. Оценка и оптимизация: Оценка качества модели и внесение изменений для улучшения ее геометрии и энергетики.

Качество модели зависит от:

- Идентичности последовательностей: Чем выше идентичность последовательностей между целевым белком и шаблоном, тем лучше качество модели.
- Качества структуры шаблона: Структура шаблона должна быть высокого разрешения и надежной.
- Алгоритма моделирования: Разные алгоритмы могут давать разные результаты.
- Оптимизации модели: Правильная оптимизация модели улучшает ее геометрию и энергетику.

Оценка качества модели:

- Проверка геометрии: Анализ длин связей, углов связей и торсионных углов.
- Энергетическая оценка: Оценка энергии модели с помощью силовых полей.
- Сравнение с экспериментальными данными: Сравнение модели с данными, полученными с помощью других методов (например, сайт-направленного мутагенеза).
- Использование специализированных программ для оценки качества модели (например, PROCHECK, Verify3D).

### Задание 18

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Объясните важность учета динамики белка при изучении его функции. Приведите примеры, когда конформационные изменения белка играют ключевую роль.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

Статическая структура белка, полученная с помощью рентгеновской кристаллографии или крио-ЭМ, дает лишь "снимок" структуры в определенный момент времени. Однако, белки – это динамичные молекулы, которые постоянно изменяют свою конформацию. Динамика белка играет важную роль в его функционировании:

- Катализ ферментов: Многие ферменты претерпевают конформационные изменения при связывании с субстратом и во время каталитической реакции.
- Белок-белковые взаимодействия: Конформационные изменения могут регулировать взаимодействие между белками, например, при образовании сигнальных комплексов.
- Транспорт через мембраны: Мембранные белки изменяют свою конформацию для переноса ионов или молекул через мембрану.
- Регуляция генной экспрессии: Факторы транскрипции изменяют свою конформацию при связывании с ДНК, регулируя экспрессию генов.

Примеры:

- Гемоглобин: Связывание кислорода с одним гемом вызывает конформационные изменения, которые увеличивают аффинность к кислороду других гемов (кооперативность).
- Киназы: Активность киназ регулируется конформационными изменениями, которые открывают или закрывают активный центр.

### Задание 19

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Объясните, как знание структуры белка может помочь в разработке лекарств.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ: Знание структуры белка-мишени позволяет:

- Идентифицировать активный центр или участок связывания.
- Разрабатывать молекулы, которые специфически связываются с мишенью, блокируя или модулируя её функцию (структурно-ориентированный дизайн лекарств).
- Прогнозировать аффинность и селективность потенциальных лекарственных кандидатов.
- Оптимизировать структуру лекарства для улучшения его фармакокинетических свойств.
- Предсказывать возможные побочные эффекты, основанные на взаимодействиях лекарства с другими белками.

### Задание 20

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

В чем разница между гомологичным моделированием и предсказанием структуры ab initio?

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

- Гомологичное моделирование: Основано на использовании известных структур белков-гомологов (шаблонов) для построения модели целевого белка. Требует наличия значительной идентичности последовательностей (обычно >30%).
- Предсказание ab initio: Пытается предсказать структуру белка исключительно на основе его аминокислотной последовательности и физических принципов, без использования структурных шаблонов. Это более сложная задача, но необходимая, когда нет известных гомологов.

### Задание 21

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Какие типы информации можно получить из молекулярно-динамического моделирования белка?

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ: Молекулярная динамика позволяет получить информацию о:

- Конформационных изменениях белка во времени.

- Гибкости различных участков белка.
- Взаимодействии белка с другими молекулами (лигандами, растворителем).
- Термодинамических свойствах белка (энергии, энтропии).
- Механизме действия ферментов.
- Стабильности структуры белка в различных условиях.
- Пути сворачивания и разворачивания белка.

## Задание 22

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Опишите роль баз данных структур белков (например, PDB) в структурной биоинформатике.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ: Базы данных структур белков являются ключевым ресурсом для структурной биоинформатики. Они предоставляют экспериментально определенные трехмерные координаты атомов белков и других макромолекул. Эти данные используются для:

- Поиска гомологов с известной структурой для гомологичного моделирования.
- Анализа структурных мотивов и доменов.
- Изучения механизмов действия ферментов и взаимодействия белков с другими молекулами.
- Проверки и валидации результатов предсказания структуры.
- Структурно-ориентированного дизайна лекарств.

## Задание 23

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

Объясните, как различные методы определения структуры белка (рентгеновская кристаллография, ЯМР-спектроскопия, криоэлектронная микроскопия) дополняют друг друга и в каких случаях какой метод предпочтительнее.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ:

Каждый метод определения структуры белка имеет свои сильные и слабые стороны:

- Рентгеновская кристаллография: Предоставляет структуры с высоким разрешением, но требует получения хорошо упорядоченных кристаллов, что не всегда возможно. Также, кристаллическая структура может не полностью отражать структуру белка в растворе.
- ЯМР-спектроскопия: Позволяет изучать структуру и динамику белков в растворе, а также исследовать взаимодействия с другими молекулами. Однако, ЯМР обычно ограничивается белками с относительно небольшой молекулярной массой (до 30-40 кДа).
- Криоэлектронная микроскопия (крио-ЭМ): Подходит для изучения больших комплексов и белков, которые трудно кристаллизовать. Позволяет получать структуры с разрешением, приближающимся к атомному, хотя и не всегда достигается разрешение, как в рентгеновской кристаллографии. Крио-ЭМ особенно важна для мембранных белков и крупных мультипротеиновых комплексов.

В идеале, использование нескольких методов в комбинации позволяет получить наиболее полное представление о структуре и динамике белка. Например, рентгеновская кристаллография может дать структуру с высоким разрешением, а ЯМР – информацию о конформационной гибкости. Крио-ЭМ заполняет пробелы, когда кристаллизация невозможна или изучаются крупные комплексы.

## Задание 24

*Прочитайте вопрос и запишите развернутый обоснованный ответ*

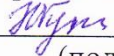
Объясните, почему важно проверять и валидировать структуры белков, полученные с помощью моделирования или экспериментальных методов.

Ответ \_\_\_\_\_

Эталонный ответ: Проверка и валидация необходимы для:

- Оценки качества и достоверности структуры.
- Выявления ошибок, которые могут возникнуть в процессе моделирования или при определении структуры (например, неправильные цепи, геометрические искажения).
- Убеждения, что структура соответствует известным физическим и химическим принципам.
- Обеспечения надежности структуры для дальнейшего использования (например, для предсказания функции или разработки лекарств).

Разработчик:



(подпись)

доцент Букин Ю.С.