УТВЕРЖДАЮ:
Первый проректор – проректор по учебной работе
_____ С.Б. Бакланов
«30» апреля 2026 г.

ПРОГРАММА

ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

(ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ)

Молекулярный докинг и машинное обучение

Программу составили:
Заборский М.А.
Викторов Д.А.
Лямина Д.А.

Рекомендовано к использованию
в учебном процессе: решением
Координационного совета
ПИШ «ФармИнжиниринг»:
протокол № 2 от 30.04.2026 г.

Ульяновск, 2026

СОДЕРЖАНИЕ

I. Паспорт программы повышения квалификации ……..... 3
II. Учебный план…… 5
Ш. Календарный учебный график…….. 6
IV. Рабочая программа …..... 7
V. Организационно-педагогические условия…..... 9
VI. Аттестация слушателей…….. 12

I. ПАСПОРТ ПРОГРАММЫ ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ

1.1 Нормативно-правовая база

1. Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 № 273-ФЗ.
2. Приказ Министерства образования и науки РФ от 24 марта 2025 г. № 266 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по дополнительным профессиональным программам»
3. Гражданский кодекс Российской Федерации Часть 4.
4. Профессиональный стандарт «Специалист по промышленной фармации в области исследований лекарственных средств» (приказ Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 22.05.2017 № 432н).

1.2. Область применения программы повышения квалификации

Программа предназначена для повышения квалификации студентов химических, биологических и биоинженерных специальностей, биоинформатиков, хемоинформатиков, биологов, биохимиков и научных сотрудников.

1.3. Цель реализации программы повышения квалификации

Программа повышения квалификации направлена на формирование у слушателей базовых теоретических знаний и практических навыков в области молекулярной докинга, необходимых для работы в фармацевтических и научных лабораториях.

№ п/п	Целеполагание программы	Университет (НПР, сотрудники, студенты)
1.	Зачем эта программа нужна слушателям	Получить дополнительные знания и навыки, опыт в области био- и хемоинформатики с использованием среды Google Colab, искусственного интеллекта, молекулярного докинга и машинного обучения
2.	Как будет проходить обучение	Обучение будет проходить с использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн»
3.	Партнерство	Биотехнологические и фармацевтические компании, занимающиеся разработкой тест-систем или поиском новых мишеней для лекарств.

1.4. Задачи реализации программы повышения квалификации

- Ознакомиться с основами проведения молекулярного докинга
- Сформировать понимание работы в облачном сервисе Google Colab
- Изучить особенности белок-лигандного (низкомолекулярного) и белок-белкового (высокомолекулярного) докинга
- Дать представление об алгоритмах работы машинного обучения на примере результатов молекулярного докинга

1.5. Планируемые результаты обучения и требования к уровню освоения содержания программы повышения квалификации

В результате обучения по дополнительной профессиональной программе повышения квалификации слушатель усовершенствует необходимые для профессиональной деятельности компетенции и овладевает соответствующими знаниями, умениями и навыками:

Профессиональные компетенции	**Соответствующая ОТФ, ТФ, ТД профстандарта**	**Уметь**	**Знать**	**Владеть**
Способен применять методы молекулярного моделирования, биоинформатического анализа и виртуального скрининга для поиска и оптимизации структур потенциальных лекарственных кандидатов.	**ОТФ:** **В** – Выполнение работ по поиску и анализу биологически активных соединений методами биоинформатики. **ТФ:** B/01.6 – Проведение виртуального скрининга библиотек химических соединений. **ТД:** **B/01.6-1** – Подготовка цифровых моделей мишеней и библиотек потенциальных лигандов для виртуального скрининга. **B/01.6-2** – Выполнение процедур молекулярного докинга и скоринга. **B/01.6-3** – Анализ результатов виртуального скрининга.	1) Выбирать и подготавливать цифровые структуры белков-рецепторов (PDB) и малых/пептидных лигандов для виртуального скрининга. 2) Работать в облачной среде Google Colab, настраивать программное окружение и использовать библиотеки Python для обработки данных. 3) Проводить расчеты молекулярного докинга, используя алгоритм AutoDock Vina для малых молекул и LightDock для белок-	1) Теоретические основы молекулярного докинга: функции скоринга (scoring functions), алгоритмы поиска конформаций и принципы работы силовых полей. 2) Различия в подходах к моделированию взаимодействий «белок-малая молекула» и «белок-пептид». 3) Методы подготовки данных и основы работы с базами данных (PDB, PubChem, CCDC). 4) Принципы машинного обучения в контексте биоинформатики.	1) Навыком автоматизации биоинформатических расчетов с помощью скриптов в облачных средах. 2) Инструментарием для докинга (AutoDock Vina, LightDock) и средствами анализа аффинности связывания. 3) Методами визуального анализа белок-лигандных контактов. 4) Технологиями верификации полученных моделей (анализ RMSD, сопоставление с экспериментальными данными).

		пептидных взаимодействий. 4) Интерпретировать результаты: проводить визуализацию комплексов и анализ типов химических связей.		

1.5. Категории слушателей

К освоению программы допускаются:

Студенты химических, биологических и биоинженерных специальностей, биоинформатики, биологи, биохимики и научные сотрудники.

1.6. Объем программы: 54 часа.

1.7.Документ, выдаваемый после завершения обучения: удостоверение о повышении квалификации установленного образца.

II. УЧЕБНЫЙ ПЛАН

№ п/п	Наименование тем	Всего часов	В том числе			Формы аттестации и контроля знаний	Формируемые компетенции
			Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа		
1	Тема 1. Основы структурной биоинформатики. Подготовка белков и лигандов. Использование ИИ для написания простых скриптов предобработки в Google Colab.	14	6	4	4	Защита протокола практической работы	ПК-1
2	Тема 2. Докинг малых молекул посредством AutoDock Vina. Виртуальный	18	6	6	6	Защита протокола практической работы	ПК-1

	скрининг и анализ результатов. Работа с готовыми блокнотами в Google Colab.						
3	Тема 3. Белок-белковый докинг с использованием LightDock. Особенности крупных лигандов. Визуализация и анализ результатов.	18	6	6	6	Защита протокола практической работы	ПК-1
Итоговая аттестация		4	–	2	2		
Итого		**54**	**18**	**18**	**18**		

Ш. КАЛЕНДАРНЫЙ УЧЕБНЫЙ ГРАФИК

Форма обучения – очная с применением дистанционных образовательных технологий и использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн». Самостоятельная работа слушателя предполагает работу по предоставляемым методическим материалам, выполнение практических заданий.

Тема занятия	Количество часов	Дата проведения	Место проведения
Тема 1. Основы структурной биоинформатики. Подготовка белков и лигандов. Использование ИИ для написания простых скриптов предобработки в Google Colab.	14		Ульяновский государственный университет, ПИШ
Тема 2. Докинг малых молекул посредством AutoDock Vina. Виртуальный скрининг и анализ результатов. Работа с готовыми блокнотами в Google Colab.	18		Ульяновский государственный университет, ПИШ
Тема 3. Белок-белковый докинг с использованием LightDock. Особенности крупных лигандов. Визуализация и анализ результатов.	18		Ульяновский государственный университет, ПИШ

IV. РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Содержание
2. Самостоятельная работа слушателя
3. Условия реализации программы
4. Контроль и оценка результатов освоения программы

1. Содержание

Тема 1. Основы структурной биоинформатики. Подготовка белков и лигандов. Использование ИИ для написания простых скриптов предобработки в Google Colab.

Пептиды и белки: химическое строение и виды пространственных структур.

Работа с базами данных PDB (Protein Data Bank), PubChem, CCDC и форматами файлов (.pdb, .sdf, .mol2, .cif).

Подготовка белкового рецептора к докингу с помощью программы UCSF ChimeraX.

Генерация 3D-конформаций молекул пептидов из 2D-строк с помощью EsmFold.

Настройка и работа в среде Google Colab с использованием библиотек RDKit, Biopython, Meeko и Gemmi.

Создание циклов на Python для пакетной обработки десятков белков/лигандов.

Тема 2. Докинг малых молекул посредством AutoDock Vina. Виртуальный скрининг и анализ результатов. Работа с готовыми блокнотами в Google Colab.

Конфигурация AutoDock Vina, определение координат и размеров бокса (Grid Box) активного центра белкового рецептора.

Настройка и работа в облачном сервисе SwissDock.

Механика скоринга, анализ энергетических функций (Affinity Score) и поиск наиболее вероятных поз связывания.

Автоматизация виртуального скрининга и запуск массового докинга с помощью AutoDock Vina для всех лигандов через Google Colab.

Сбор и экспорт результатов (Binding Energy, RMSD) в таблицы для дальнейшего анализа.

Отбор наиболее перспективных кандидатов.

Обучение нейросетевой (ML) модели и предсказание наиболее выгодных аминокислотных последовательностей пептидных лигандов.

Тема 3. Белок-белковый докинг с использованием LightDock. Особенности крупных лигандов. Визуализация и анализ результатов.

Особенности белок-белкового докинга.

Отличия алгоритмов LightDock (рой частиц) от стандартного докинга.

Идентификация ключевых остатков белка, участвующих в удержании пептидного лиганда.

Возможности визуализации белкового рецептора в UCSF ChimeraX.

Проведение белок-белкового докинга с помощью LightDock в среде Google Colab.

Анализ результатов белок-белкового докинга с использованием Prodigy-метрики.

Сбор и экспорт результатов (Binding Energy, RMSD) в таблицы для дальнейшего анализа.

Отбор наиболее перспективных кандидатов.

Обучение нейросетевой (ML) модели и предсказание наиболее выгодных аминокислотных последовательностей пептидных лигандов.

Практические занятия

Форма проведения: интерактивный виртуальный эксперимент.

№ п/п	Тема занятия	Форма проведения	Организация занятия
1	Тема 1. Основы структурной биоинформатики. Подготовка белков и лигандов. Использование ИИ для написания простых скриптов предобработки в Google Colab.	Интерактивный виртуальный эксперимент	Практическое занятие будет проходить с использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн» Результат: закрепление информации по строению белка и знакомство с работой в ПО CCDC Mercury и UCSF ChimeraX, а также в облачном сервисе Google Colab
2	Тема 2. Докинг малых молекул посредством AutoDock Vina. Виртуальный скрининг и анализ результатов. Работа с готовыми блокнотами в Google Colab.	Интерактивный виртуальный эксперимент	Практическое занятие будет проходить с использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн» Результат: изучение процедуры проведения докинга через AutoDock Vina в среде Google Colab и выполнение ML-алгоритма на основе полученных результатов
3	Тема 3. Белок-белковый докинг с использованием LightDock. Особенности крупных лигандов. Визуализация и анализ результатов.	Интерактивный виртуальный эксперимент	Практическое занятие будет проходить с использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн» Результат: изучение процедуры проведения докинга через LightDock в среде Google Colab и выполнение ML-алгоритма на основе полученных результатов

2. Самостоятельная работа слушателя

№ п/п	Темы самостоятельной работы	Вид самостоятельной работы	Трудоемкость, час.
1	Тема 1. Основы структурной биоинформатики. Подготовка белков и лигандов. Использование ИИ для написания простых скриптов предобработки в Google Colab.	Подбор и изучение молекул белковых лигандов и рецепторов для проведения докинга	4
2	Тема 2. Докинг малых молекул посредством AutoDock Vina. Виртуальный скрининг и анализ результатов. Работа с готовыми блокнотами в Google Colab.	Проведение докинга с использованием AutoDock Vina и выбранного белкового рецептора	6
3	Тема 3. Белок-белковый докинг с использованием LightDock. Особенности крупных лигандов. Визуализация и анализ результатов.	Проведение докинга с использованием LightDock и выбранного белкового рецептора	6
Итого			18

Практические задания для самостоятельной работы

1. De Novo генерация первичной структуры пептидов с заданием целевых свойств.
2. Построение 3D-структуры аминокислотной последовательности через EsmFold.
3. Проведение низкомолекулярного докинга через AutoDock Vina в среде Google Colab.
4. Проведение высокомолекулярного докинга через LightDock в среде Google Colab.
5. ML-тренинг и предсказание структуры наиболее выгодных пептидных лигандов.

V. ОРГАНИЗАЦИОННО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ

5.1. Организационные условия

Программа реализуется на площадке ПИШ «ФармИнжиниринг» в специальных образовательных пространствах с использованием интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн».

При реализации образовательной программы используются информационно-коммуникационные технологии.

5.2. Материально-технические условия

Аудитории, укомплектованные специализированной мебелью, учебной доской.

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде, электронно-библиотечной системе.

Проведение практических занятий на базе интерактивного распределенного образовательного комплекса «Эксперимент онлайн», который оснащен современными компьютерами, производительности которых достаточно для работы с ресурсоемкими ПО (UCSF ChimeraX, CCDC Mercury) и в облачном сервисе Google Colab.

5.3. Кадровые условия

Привлечение в качестве преподавателей специалистов-практиков, имеющих опыт участия в R&D проектах и обладающих экспертизой в области биоинформатики и молекулярного дизайна.

Одним из условий качественной подготовки слушателей является наличие высокопрофессиональных преподавателей, имеющих опыт реализации проектов в области молекулярного дизайна и научно-исследовательской работы в области биоинформатики, которые обеспечивают организационно-учебные и внеучебные формы освоения программы; осуществляют функции контроля и оценки.

5.4. Информационное обеспечение обучения

5.4.1. Перечень рекомендуемых учебных изданий

а) Список рекомендуемой литературы

основная

1. 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.
2. Хёльтье, Х.-Д. Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х.-Д. Хёльтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/151560

дополнительная

1. Eberhardt, J. AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings / J. Eberhardt, D. Santos-Martins, A. F. Tillack, S. Forli. — Текст : электронный // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2021. — Vol. 61, No. 8. — P. 3891–3898. — DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00203.
2. Jiménez-García, B. LightDock: a new multi-scale approach to protein–protein docking / B. Jiménez-García, J. Roel-Touris, M. Romero-Durana [et al.]. — Текст : электронный // Bioinformatics. — 2018. — Vol. 34, No. 1. — P. 49–55. — DOI: 10.1093/bioinformatics/btx555.

б)Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Электронно-библиотечные системы:

1.1. Цифровой образовательный ресурс IPRsmart : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа». - Саратов, [2024]. – URL: http://www.iprbookshop.ru. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.2. Образовательная платформа ЮРАЙТ : образовательный ресурс, электронная библиотека : сайт / ООО Электронное издательство «ЮРАЙТ». – Москва, [2024]. - URL: https://urait.ru . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.3. База данных «Электронная библиотека технического ВУЗа (ЭБС «Консультант студента») : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Политехресурс». – Москва, [2024]. – URL: https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4x. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.4. Консультант врача. Электронная медицинская библиотека : база данных : сайт / ООО «Высшая школа организации и управления здравоохранением-Комплексный медицинский консалтинг». – Москва, [2024]. – URL: https://www.rosmedlib.ru. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.5. Большая медицинская библиотека : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Букап». – Томск, [2024]. – URL: https://www.books-up.ru/ru/library/ . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.6. ЭБС Лань : электронно-библиотечная система : сайт / ООО ЭБС «Лань». – Санкт-Петербург, [2024]. – URL: https://e.lanbook.com. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.7. ЭБС Znanium.com : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Знаниум». - Москва, [2024]. - URL: http://znanium.com . – Режим доступа : для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

2. КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: справочная правовая система. / ООО «Консультант Плюс» - Электрон. дан. - Москва : КонсультантПлюс, [2024].

3. eLIBRARY.RU: научная электронная библиотека : сайт / ООО «Научная Электронная Библиотека». – Москва, [2024]. – URL: http://elibrary.ru. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный

4. Федеральная государственная информационная система «Национальная электронная библиотека» : электронная библиотека : сайт / ФГБУ РГБ. – Москва, [2024]. – URL: https://нэб.рф. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

5. Российское образование : федеральный портал / учредитель ФГАУ «ФИЦТО». – URL: http://www.edu.ru. – Текст : электронный.

6. Электронная библиотечная система УлГУ : модуль «Электронная библиотека» АБИС Мега-ПРО / ООО «Дата Экспресс». – URL: http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Web. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

5.4.2. Перечень Интернет-ресурсов

5.4.2.1. Электронно-библиотечные системы:

1.1. Цифровой образовательный ресурс IPRsmart : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа». - Саратов, [2023]. – URL: http://www.iprbookshop.ru. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.2. Образовательная платформа ЮРАЙТ : образовательный ресурс, электронная библиотека : сайт / ООО Электронное издательство «ЮРАЙТ». – Москва, [2023]. - URL: https://urait.ru. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.3. База данных «Электронная библиотека технического ВУЗа (ЭБС «Консультант студента») : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Политехресурс». – Москва,

[2023]. – URL: https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4x. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.4. Консультант врача. Электронная медицинская библиотека : база данных : сайт / ООО «Высшая школа организации и управления здравоохранением-Комплексный медицинский консалтинг». – Москва, [2023]. – URL: https://www.rosmedlib.ru. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.5. Большая медицинская библиотека : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Букап». – Томск, [2023]. – URL: https://www.books-up.ru/ru/library/ . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.6. ЭБС Лань : электронно-библиотечная система : сайт / ООО ЭБС «Лань». – Санкт-Петербург, [2023]. – URL: https://e.lanbook.com. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.7. ЭБС Znanium.com : электронно-библиотечная система : сайт / ООО «Знаниум». - Москва, [2023]. - URL: http://znanium.com . – Режим доступа : для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

2. КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: справочная правовая система. / ООО «Консультант Плюс» - Электрон. дан. - Москва : КонсультантПлюс, [2023].

3. Базы данных периодических изданий:

3.1. eLIBRARY.RU: научная электронная библиотека : сайт / ООО «Научная Электронная Библиотека». – Москва, [2023]. – URL: http://elibrary.ru. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный

3.2. Электронная библиотека «Издательского дома «Гребенников» (Grebinnikon) : электронная библиотека / ООО ИД «Гребенников». – Москва, [2023]. – URL: https://id2.action-media.ru/Personal/Products. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный.

4. Федеральная государственная информационная система «Национальная электронная библиотека» : электронная библиотека : сайт / ФГБУ РГБ. – Москва, [2023]. – URL: https://нэб.рф. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

5. Российское образование : федеральный портал / учредитель ФГАУ «ФИЦТО». – URL: http://www.edu.ru. – Текст : электронный.

6. Электронная библиотечная система УлГУ : модуль «Электронная библиотека» АБИС Мега-ПРО / ООО «Дата Экспресс». – URL: http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Web. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

VI. АТТЕСТАЦИЯ СЛУШАТЕЛЕЙ

Промежуточная аттестация по темам проходит в формате зачета выполнения промежуточных практических работ.

Итоговая аттестация (зачет) по программе проводится в форме выполнения индивидуального проекта. Предусмотрено консультирование слушателей, разбор ответов на сложные вопросы до защиты проекта.

Критерии для оценивания

- **Критерии оценивания:** полнота прохождения этапов пайплайна, корректность подготовки структур, обоснованность выбора параметров докинга и интерпретация результатов.

- **Показатель оценивания:** сумма баллов за выполнение ключевых этапов проекта (подготовка, расчет, анализ).

Шкала оценивания (оценка): выделено 4 уровня владения компетенциями:

Высокий – проект выполнен в полном объеме. Студент обосновал выбор положения лиганда, успешно провел фильтрацию результатов, визуализировал ключевые взаимодействия и сделал верные выводы о стабильности комплекса.
Достаточный – все основные этапы (подготовка, докинг, анализ) пройдены, но допущены незначительные неточности в оформлении или интерпретации второстепенных связей.
Пороговый – расчеты проведены успешно, получен финальный комплекс, однако отсутствуют глубокие выводы по результатам или допущены ошибки в процессе подготовки структур.
Критический – расчеты не завершены, нарушена логика подготовки данных (белок и/или лиганд не подготовлены), интерпретация результатов отсутствует.

Шкала оценивания знаний слушателей на зачете

1. Оценка **«зачтено»** выставляется слушателю, выполнившему проект на пороговом уровне и выше (успешное получение финальных поз докинга и их базовая визуализация).
2. Оценка **«не зачтено»** выставляется слушателю, не выполнившему основные этапы проекта или допустившему критические ошибки в подготовке биомолекул, делающие расчеты недостоверными.