

## АННОТАЦИЯ

учебной дисциплины «Компьютерный дизайн лекарственных средств»  
Направление подготовки 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»  
Образовательная программа «Биоинформатика и анализ данных в биологии и медицине»  
Отделение Биотехнологий

### Цель изучения дисциплины:

- применение современных вычислительных методов и технологий для ускорения и улучшения процесса разработки новых лекарственных препаратов. Эта дисциплина объединяет знания из области химии, биологии, фармакологии, информатики и инженерии с целью оптимизировать процедуры открытия, дизайна и оптимизации лекарств.

### Задачи изучения дисциплины:

- Создание и анализ трехмерных моделей молекул лекарств и их взаимодействия с биологическими мишенями для понимания механизмов действия.
- Проведение компьютерных экспериментов для поиска потенциальных кандидатов на лекарственные препараты среди баз данных химических соединений.
- Определение связывания между молекулами лекарств и биологическими целями, что позволяет предсказать эффективность и селективность лекарственных препаратов.
- Исследование и модификация структуры молекул с целью улучшения их фармакокинетических и фармакодинамических характеристик.
- Использование моделирования для предварительной оценки возможных нежелательных эффектов лекарственных препаратов.
- Разработка совершенно новых молекул на основе вычислительных алгоритмов и знаний о молекулярной взаимосвязи.
- Раскрытие молекулярных механизмов, через которые лекарственные препараты взаимодействуют с биологическими системами.
- Объединение информации о структуре, активности и свойствах молекул для принятия более информированных решений.
- Определение оптимальных дозировок лекарств на основе их фармакокинетических свойств.
- Взаимодействие с химиками, биологами, фармацевтами и информатиками для комбинирования знаний и навыков в разных областях.

### Место дисциплины в структуре ООП:

дисциплина реализуется в рамках части, формируемой участниками образовательных отношений; изучается на 1 курсе во 2 семестре.

### Общая трудоемкость дисциплины:

3 зачетных единицы

### Компетенции, формируемые в результате освоения учебной дисциплины:

ПК-2 Способен к разработке и внедрению наукоемкого программного обеспечения, способствующего решению передовых задач науки и техники на основе современных математических методов и алгоритмов

ПК-11 Способен использовать инструменты и методы биоинформатики для анализа результатов высокопроизводительного секвенирования и OMICS данных при выполнении диагностических, клинических и научных исследований.

### Индикаторы достижения компетенций:

З-ПК-2 Знать текущее положение современных научных достижений, современные математические методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения.

У-ПК-2 Уметь применять современные математические методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения

В-ПК-2 Владеть навыками разработки и внедрения наукоемкого программного обеспечения

З-ПК-11. Основы молекулярной биологии, медицинской генетики, современные методы

протеомики, метаболомики, метагеномики и геносистематики.

У-ПК-11. использовать базовые алгоритмические знания и представления об алгоритмах анализа больших массивов современных биологических и медикобиологических данных.

В-ПК-11. современными цифровыми информационными технологиями для сбора, хранения, обработки, анализа и передачи научной информации, в том числе для работы с базами данных (Big Data).

**Форма итогового контроля:**

зачет.