МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
 ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ   
**«РОССИЙСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ МЕДИЦИНСКИЙ**

**УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.И.ПИРОГОВА»**

**МИНИСТЕРСТВА ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

(ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России)

|  |
| --- |
| Кафедра биоинформатики МБФ  *Кафедра* |

|  |
| --- |
| **ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ПЛАН РАБОТЫ АСПИРАНТА** |

Смирнов Антон Сергеевич

*Фамилия Имя Отчество*

Научная специальность *\_\_\_\_\_\_*1.5.8 Математическая биология, биоинформатика*\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_*

*Код и наименование*

Направленность (профиль) \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*(при наличии)*

Срок получения образования \_\_\_\_\_4 года (2023-2027)\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Зачислен приказом Университета от «22» сентября 2023 г. № 469 а/о

Научный руководитель \_\_Лагунин Алексей Александрович, зав.каф., д.б.н., проф. РАН\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*Фамилия Имя Отчество, должность, ученая степень, ученое звание*

*\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_*

Тема диссертации Создание метода прогнозирования распознавания эпитопов Т- и В-клеточными рецепторами на основе структурных формул фрагментов белков

Индивидуальный план работы аспиранта

утвержден на заседании кафедры от «19» октября 2023 г. протокол № 2

1. **ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА К ВЫБОРУ ТЕМЫ ДИССЕРТАЦИИ**

**Актуальность**

Пандемия коронавируса, начавшаяся в 2020 году, показала необходимость крайне быстрой разработки иммунобиологических препаратов: вакцин, терапевтических моноклональных антител, иммунодиагностикумов. Тестирование всех возможных вариантов экспериментально представляет трудоемкую, дорогую и часто непосильную задачу. Для сужения экспериментального поиска прибегают к использованию вычислительных моделей. Они позволяют оценить силу взаимодействия рецептора с антигеном, безопасность, физико-химические параметры будущего препарата. Благодаря им можно значительно удешевить и ускорить разработку, однако существующие модели обладают довольно слабой прогностической способностью, особенно для слабо изученных антигенов.

**Предполагаемая научная новизна**

Новизна данной работы заключается в использовании методов хемоинформатики для предсказания возможных T- и В- эпитопов и моделирования их взаимодействия с Т-клеточными рецепторами и MHC: использование моделей «структура-активность», представление фрагментов белков в виде структурных формул описанных подструктурными дескрипторами. Кроме того, планируется объединение построенных моделей в единую систему, которая работает в двух сценариях:

* На вход система получает протеом «возбудителя», на выходе пользователь получает список эпитопов и рецепторов, которые будут лучше всего взаимодействовать с ними.
* На вход система получает иммунный репертуар рецепторов клеток, на выходе пользователь получает спектр антигенов, распознаваемые входным репертуаром.

**Ожидаемые научные и практические результаты**

Ожидаемый результат – создание компьютерных моделей для прогноза T- и В- эпитопов и их взаимодействия с Т-клеточными рецепторами и MHC, реализованных в виде свободно доступного веб-сервиса для предсказания антигенных сайтов (эпитопов) по последовательности белка, так и последовательностей рецепторов (паратопов), распознающих их. Кроме этого, будут проведены исследования, направленные на увеличение прогностической способности моделей «структура-свойство» для данного семейства задач (предсказание белок-белковых взаимодействий). Будет проведено сравнение работы существующих аналогов с разработанным методом. Целевой аудиторией разрабатываемого веб-сервиса являются разработчики биологических препаратов: вакцин, иммунодиагностикумов, моноклональных диагностических и терапевтических антител и других. Подобные сервисы им необходимы для сужения области поиска, оценки эффективности и безопасности разработок. Данный веб-сервис может быть зарегистрирован как программа для ЭВМ в ФИПС. Методы по улучшению прогностической силы моделей «структура-свойство» может быть зарегистрировано как результат интеллектуальной деятельности.

1. **ИНИДВИДУАЛЬНЫЙ ПЛАН РАБОТЫ АСПИРАНТА**

**1-й год обучения**

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Наименование работ | Объём и краткое содержание работ[[1]](#footnote-1) | | Форма отчетности (опрос, презентация, экзамен, зачет, статья, глава диссертации и пр.) | | Срок  выполнения (полугодие) | Отметка о выполнении (оценка, дата) |
| 1. **Индивидуальный план научной деятельности** | | | | | | | |
|  | Обновление TCR-Pred | Обновить обучающую выборку и существующие модели для предсказания взаимодействия Т-клеточных рецепторов и эпитопов. | | Файлы с моделями | | 2 полугодие 2023 |  |
|  | Построение моделей взаимодействия пептид-MHC | Подготовка обучающей и тестовой выборок, создание и валидация классификационных моделей взпимодействия эпитопов и HLA аллелей. | | Статья | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
|  | Подготовка обзора по существующим методам предсказания Т-клеточных эпитопов | Анализ литературы, подготовка статьи к публикации | | Статья | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
|  | Исследование предсказательной способности различных дескрипторов для предсказания Т- и В-клеточных эпитопов | Написание программы для генерации дескрипторов, подготовка данных, расчет предсказательной способности | | Отчет | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
|  | Создание обучающих выборок | Создание обучающих выборок для классификационных моделей предсказания Т- и В-клеточных эпитопов. | | Файлы с данными | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
| 1. **Индивидуальный учебный план** | | | | | | | |
| 2.1 | Дисциплины (модули), в том числе направленные на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов | | | | | | |
|  | Педагогика | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Зачет | | 2 полугодие 2023 |  |
|  | Биоэтика | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Зачет | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
|  | Информатика | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Зачет | | 1полугодие 2024 |  |
|  | Организация научно-исследовательской  деятельности | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Зачет | | 2 полугодие 2023 |  |
|  | История и философия науки | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Экзамен | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
|  | Иностранный язык | Посещение занятий, выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ, аудирование | | Экзамен | | 2 полугодие 2023 -1полугодие 2024 |  |
| 2.2 | Элективные дисциплины (модули) | | | | | | |
|  |  |  | |  | |  |  |
|  |  |  | |  | |  |  |
| 2.3 | Факультативные дисциплины (модули) | | | | | | |
|  |  |  | |  | |  |  |
|  |  |  | |  | |  |  |
| Аспирант \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Смирнов А.С./ | | | «19» октября 2023 г. | |
| Научный  руководитель \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Лагунин А.А./ | | | «19» октября 2023 г. | |

**2-й год обучения**

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Наименование работ | Объём и краткое содержание работ | | Форма отчетности (экзамен, зачет, статья, глава диссертации и пр.) | | Срок  выполнения (полугодие) | Отметка о выполнении (оценка, дата) |
| 1. **Индивидуальный план научной деятельности** | | | | | | | |
|  | Построение и валидация моделей предсказания процессинга антигенов для MHC I и MHC II | Подготовка данных, построение моделей, сравнение с аналогами | | Статья/тезис конференции | | 2 полугодие 2024 |  |
|  | Построение и валидация моделей предсказания В-клеточных эпитопов | Подготовка данных, построение моделей, сравнение с аналогами | | Статья/тезис конференции | | 1 полугодие 2025 |  |
|  | Описание материалов и методов | Систематизация лабораторных журналов, обзор литературы, Написание и редактура текста | | Глава диссертации | | 1 полугодие 2025 |  |
|  | Написание введения | Написание и редактура текста, обзор литературы | | Глава диссертации | | 1 полугодие 2025 |  |
| 1. **Индивидуальный учебный план** | | | | | | | |
| 2.1 | Дисциплины (модули), в том числе направленные на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов | | | | | | |
|  | Математическая биология,  биоинформатика | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Экзамен | | 2 полугодие 2024 – 1 полугодие 2025 |  |
| 2.2 | Элективные дисциплины (модули) | | | | | | |
|  | Машинное обучение | Посещение лекций, занятий. выполнение письменных работ на занятиях, домашних работ | | Зачет | | 1 полугодие 2025 |  |
| 2.3 | Факультативные дисциплины (модули) | | | | | | |
|  |  | | | | | | |
| 2.4 | Практика | | | | | | |
|  | Педагогическая практика | Преподавание практических занятий по дисциплинам «Информатика», «Элементы высшей математики и информатики», «Биоинформатика», «R, биостатистика» | | Отчет по практике | | 1 полугодие 2025 |  |
| Аспирант \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Смирнов А.С./ | | | «19» октября 2023 г. | |
| Научный  руководитель \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Лагунин А.А./ | | | «19» октября 2023 г. | |

**3-й год обучения**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Наименование работ | Объём и краткое содержание работ | Форма отчетности (экзамен, зачет, статья, глава диссертации и пр.) | Срок  выполнения (полугодие) | Отметка о выполнении (оценка, дата) |
| 1. **Индивидуальный план научной деятельности** | | | | | |
|  | Разработка веб-сервиса | Написание кода системы, сравнение точности работы с аналогами | Статья, веб-сайт | 2 полугодие 2025 – 1 полугодие 2026 |  |
|  | Написание литературного обзора | Обзор литературы, написание и редактура текста | Глава диссертации | 1 полугодие 2026 |  |
| 1. **Итоговая аттестация (научный компонент)** | | | | | |
|  |  |  |  |  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Аспирант \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Смирнов А.С./ | «19» октября 2023 г. |
| Научный  руководитель \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Лагунин А.А./ | «19» октября 2023 г. |

**4-й год обучения[[2]](#footnote-2)**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Наименование работ | Объём и краткое содержание работ | Форма отчетности (экзамен, зачет, статья, глава диссертации и пр.) | Срок  выполнения (полугодие) | Отметка о выполнении (оценка, дата) |
| **1. Индивидуальный план научной деятельности** | | | | | |
|  | Написание главы «Результаты» | Написание и редактура текста | Глава диссертации | 2 полугодие 2026 |  |
|  | Написание главы «Выводы» | Написание и редактура текста | Глава диссертации | 2 полугодие 2026 |  |
|  | Применение разработки для решения практических задач | Применение построенных моделей для конкретных задач в онкологии, в исследовании инфекционных заболеваний и иммунологии | Тезис на конференции | 2 полугодие 2026 – 1 полугодие 2027 |  |
| **3. Итоговая аттестация (научный компонент)** | | | | | |
|  | Апробация диссертации | Подготовка документов и текстов диссертации к защите, подготовка презентации |  | 1 полугодие 2027 |  |
|  | Защита диссертации | Подготовка документов и текстов диссертации к защите, подготовка презентации |  | 1 полугодие 2027 |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Аспирант \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Смирнов А.С./ | «19» октября 2023 г. |
| Научный  руководитель \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Лагунин А.А./ | «19» октября 2023 г. |

1. *Описать, в том числе, перечень учебно-методических материалов, библиотечных фондов и библиотечно-справочных систем, а также информационных, информационно-справочных систем, профессиональных баз данных, которые аспирант будет использовать в ходе выполнения ИПР (в соответствии с утвержденной программой аспирантуры).*

   *Норма обеспеченности учебными изданиями определяется исходя из расчета не менее одного учебного издания в печатной и (или) электронной форме на каждого аспиранта по каждой дисциплине (модулю), входящей в ИПР.* [↑](#footnote-ref-1)
2. *Для программ аспирантуры со сроком получения образования 4 года* [↑](#footnote-ref-2)