



SWSU Case Championship 2019

Всероссийский чемпионат по решению инженерных кейсов



Секция



Химические и нанотехнологии

Кейс



Создание алгоритма по восстановлению третичной структуры белка

При поддержке



Кейс от компании



BIOCAD
Biotechnology Company

Компания **BIOCAD** создана в **2001** году. Это одна из крупнейших международных инновационных биотехнологических компаний в России, объединившая научно-исследовательские центры мирового уровня, современное фармацевтическое и биотехнологическое производство, доклинические и клинические исследования, соответствующие международным стандартам. Штат компании – более **2200** человек, около **40%** — научные сотрудники и исследователи

BIOCAD – компания полного цикла создания лекарственных препаратов от поиска молекулы до массового производства и маркетинговой поддержки. Компания фокусируется на препаратах для терапии онкологических, аутоиммунных и инфекционных заболеваний, также ведет разработки в области терапии других социально значимых заболеваний.

В продуктовый портфель входит **58** лекарственных препаратов, **16** из которых – биологические. Еще более **40** продуктов находятся на разных стадиях разработки.



Практически неотъемлемой частью при разработке терапевтических препаратов методами *in-silico* является трёхмерная структура белка. Существует открытая база **PDB** (www.rcsb.org), которая хранит более **150 000** подобных структур, полученных в ходе различных экспериментов.

К сожалению, в ходе эксперимента по нахождению структуры часть информации либо теряется, либо её просто невозможно получить. Это приводит к тому, что часть структуры может быть неизвестна: от отдельных атомов до нескольких аминокислот.

С другой стороны, весь существующий биоинформатический софт, который используется для получения лекарств, очень чувствителен к качеству структуры белка.

Поэтому использовать структуру без предобработки невозможно. Общедоступного и качественного инструмента для решения этой проблемы ещё не существует.

Из коммерческих предложений, которые решают подобную задачу, можно привести **ProteinPreparationWizard** от компании **Schrodinger**.



Цель - разработка инструмента, который исправляет и восстанавливает проблемные области в структуре белка.

Ниже приведены **задачи** в порядке **возрастания** сложности:

- восстановление водородов
- восстановление тяжёлых атомов
- восстановление боковых цепей
- восстановление аминокислот
- восстановление цепочки из нескольких аминокислот



Для выполнения данной работы потребуются только публично доступные ресурсы.

Среди многочисленных вариантов можно выделить:



Protein Data Bank (www.rcsb.org)



Система молекулярного моделирования и визуализации PyMol (pymol.org/2/)



Презентация Microsoft Office PowerPoint не более **20** слайдов формата **A3**, включая:

Слайд 1. Титульный слайд, который должен содержать следующую информацию: название кейса, логотип команды, ФИО капитана, ВУЗ, контакты.

Слайд 2. Представление команды: фотография, ФИО, специальность, курс, опыт участия в других кейс-чемпионатах каждого участника. Дополнительная информация о профессиональных компетенциях участников и достижениях команды.

Основными критериями оценки представленных на конкурс решений являются:

- *реализуемость решения*
- *проработанность решения*
- *оценка экономического эффекта*
- *оригинальность и инновационность*
- *презентация*

