

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)**

Медико-биологический факультет

«УТВЕРЖДАЮ»

**Декан медико-биологического
факультета**

д-р биол. наук, проф.

Е.Б. Прохорчук



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б.1.В.О.1 КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ**

**для образовательной программы высшего образования -
программы магистратуры
по направлению обучения
06.04.01 Биология**

Москва 2020 г.

Настоящая рабочая программа дисциплины «Компьютерное конструирование лекарств» (Далее – рабочая программа дисциплины), является частью программы магистратуры по направлению подготовки 06.04.01 биология.

Направленность (профиль) образовательной программы: медицинская биоинформатика.

Форма обучения: очная.

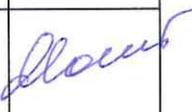
Рабочая программа дисциплины подготовлена на кафедре Биоинформатики (далее – кафедра) ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России авторским коллективом под руководством Лагунина А.А., доктора биологических наук, профессора РАН.

Составители:

№ п.п.	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Шилов Борис Владимирович	канд. мед. наук, доц.	Доцент кафедры биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	
2.	Лагунин Алексей Александрович	д-р биол. наук, проф.	Заведующий кафедрой биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры (Протокол № 4 от «15» апреля 2020 г.).

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п.п.	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Мошковский Сергей Александрович	д-р биол. наук, проф.	заведующий кафедрой биохимии МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена советом медико-биологического факультета, протокол № 6 от «25» июня 2020 г.

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

- 1) Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 06.04.01 Биология, утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации «23» сентября 2015 г. № 1052
- 2) Общая характеристика образовательной программы.
- 3) Учебный план образовательной программы.
- 4) Устав и локальные акты Университета.

1. Общие положения

1.1. Цель и задачи дисциплины:

1.1.1. Целью освоения дисциплины «Компьютерное конструирование лекарств» является формирование системных знаний по аспектам связанным с поиском и созданием новых лекарственных веществ, приобретение умений и навыков по основным компьютерным методам, компьютерным программам и базам данных, применяющимся на разных этапах исследования и конструирования лекарственных веществ.

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения программы дисциплины:

- Сформировать основы представления химической информации и анализа зависимости «структура-активность» физиологически активных соединений.
- Сформировать системные знания по хемоинформатике, связанных с поиском и созданием новых лекарственных веществ.
- Выработать у студентов способности использовать доступные интернет ресурсы для поиска и анализа информации о биологической активности соединений, полученных путем химического и биологического синтеза.
- Формировать представлений о компьютерной фармакологии и токсикологии.

1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы:

Дисциплина изучается во 2-м и 3-м семестрах и относится к части, формируемой участниками образовательного процесса Блока Б1 Дисциплины. Является обязательной дисциплиной.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие знания, умения и навыки, формируемые предыдущим образованием:

- Перевод профессиональной литературы
- Статистический язык программирования R
- Алгоритмы программирования
- Информационно-коммуникационные технологии
- Биоинформатика
- Физиологии человека
- Микробиология, вирусология
- Общая фармакология
- Общая патология
- Биохимия
- Молекулярные основы поиска новых лекарственных веществ

Знания, умения и навыки, сформированные на дисциплине Медицинская биоинформатика и функциональная геномика, будут использованы при изучении дисциплин:

- Практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (лаборантская практика),
- Научно-исследовательская работа (НИР),
- Преддипломной практика,
- Выпускная квалификационная работа.

1.3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы:

Планируемые результаты обучения по дисциплине: (знания, умения навыки)	Компетенции студента, на формирование, которых направлены результаты обучения по дисциплине	Шифр компетенции
Общекультурные компетенции		
<p>Знать: основные подходы к представлению информации о структуре химических соединений и анализу взаимосвязи «структура-активность»</p> <p>Уметь: создавать компьютерные модели зависимости «структура-активность»</p> <p>Владеть навыками использования компьютерных программ и баз данных для создания компьютерных моделей зависимостей «структура-активность»</p>	Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	ОК-1
Общепрофессиональные компетенции		
<p>Знать: основные идентификаторы и форматы представления структур химических соединений; методы машинного обучения; основные физико-химические свойства; единицы измерения и виды данных описывающих фармакологические свойства лекарственных соединений</p> <p>Уметь: применять методами анализа связи «структура-активность»</p> <p>Владеть: компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, Autodock, необходимыми для анализа связи «структура-активность»</p>	Способность самостоятельно анализировать имеющуюся информацию, выявлять фундаментальные проблемы, ставить задачу и выполнять полевые, лабораторные биологические исследования при решении конкретных задач с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, нести ответственность за качество работ и научную достоверность результатов	ОПК-4
<p>Знать: основные электронные базы данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности, свободно владеть средствами доступа к ним через интернет</p> <p>Уметь: работать с основными электронными базами-данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности</p> <p>Владеть навыками поиска, хранения и обработки данных, связанных со структурами, биологической активностью и физико-химическими свойствами химических соединений и лекарств</p>	Готовность творчески применять современные компьютерные технологии при сборе, хранении, обработке, анализе и передаче биологической информации для решения профессиональных задач	ОПК-7
Профессиональные компетенции		
<p>Знать: основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в компьютерном конструировании лекарств</p> <p>Уметь: качественно и количественно, оценивать статистическую значимость получаемых результатов</p> <p>Владеть: навыками использования основных принципов, алгоритмов и методов используемых в компьютерном конструировании лекарств</p>	Способностью творчески использовать в научной и производственно-технологической деятельности знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин (модулей), определяющих направленность (профиль) программы магистратуры	ПК-1
<p>Знать: основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств; использование информационных компьютерных систем хранящих информацию о структуре и биологической активности веществ</p> <p>Уметь: самостоятельно формулировать задачу для создания моделей «структура-свойство»; пользоваться учебной, научной, научно-популярной литературой, сетью Интернет для профессиональной деятельности</p>	Способность генерировать новые идеи и методические решения	ПК-4

3. Содержание дисциплины

3.1 Содержание разделов, тем дисциплины

2 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1.	ОК-1 ОПК-4 ОПК-7 ПК-1 ПК-4	Хемоинформатика	Основные методы и подходы. Форматы представления структур. Идентификаторы химических соединений. Наиболее известные базы данных (БД) представляющие информацию о структурах и биологической активности химических соединений. Описание химических соединений в (БД), молекулярные отпечатки. Анализ графов в хемоинформатике. Методы поиска химических соединений в базах данных. Сходство химических соединений и понятие «activity cliff». Основные методы и подходы анализа связи «структура-свойство». (Q)SAR. Дескрипторы химических соединений. Методы машинного обучения, используемые при построении взаимосвязи «структура-активность». Валидация (Q)SAR моделей. Компьютерные программы и интернет ресурсы, используемые для оценки фармакологических и физико-химических свойств лекарственно-подобных соединений. KNIME
2.	ОК-1 ОПК-4 ОПК-7 ПК-1 ПК-4	Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов лекарственных соединений на основе данных о структуре лигандов	Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов и взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка всасывания биотранспорта, распределения, метаболизма и выведения в зависимости от структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка межлекарственного взаимодействия.

3 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1	ОК-1 ОПК-4 ОПК-7 ПК-1 ПК-4	3D-QSAR	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий. Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.
2	ОК-1 ОПК-4 ОПК-7 ПК-1 ПК-4	Моделирование трехмерной структуры белка.	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей. Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.
3	ОК-1 ОПК-4 ОПК-7 ПК-1 ПК-4	Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка	Виртуальный скрининг и докинг. Области применения и ограничения молекулярного докинга. Ядерный рецептор SAR и его лиганд-рецепторные комплексы.

3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися (при наличии)

Разделы и темы дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не предусмотрены.

4. Тематический план дисциплины

4.1. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем

№ п/п	Виды учебных занятий/форма промежуточной аттестации	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименование разделов. Темы учебных занятий.	Количество часов	Виды текущего контроля успеваемости **	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации ***					
					РП	ЛР	ОП	ОУ	КП	ТЭ
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2 семестр										
Раздел 1. Хемоинформатика			48							
1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур	2	Д					+	
2	ЛЗ	Общие сведения о химических базах данных. Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	Д					+	
3	ЛЗ	Основные свободно доступные базы данных с информацией о структуре, биологической активности и физико-химических свойствах низкомолекулярных соединений и лекарств PubChem, ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, PDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov и РЛС. Базы данных коммерчески доступных образцов химических соединений.	2	Д					+	
4	ЛЗ	Анализ связи «структура-свойство».	2	Д					+	
5	ЛЗ	Дескрипторы химических соединений. Алгоритмы основанные на графах.	2	Д					+	
6	ЛЗ	Валидация (Q)SAR моделей	2	Д					+	
7	ЛПЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel	3	Д, Т		+			+	
8	ЛПЗ	Работа с базой данных PubChem и ее инструментами	3	Д, Т		+			+	
9	ЛПЗ	Работа с базой данных ChEMBL и ее инструментами	3	Д, Т		+			+	

10	ЛПЗ	Работа с локальной базой данных ChEMBL	3	Д, Т		+			+	
11	ЛПЗ	Базы данных DrugBank, Zink, BindingDB, PDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov, РЛС, коммерчески доступных образцов химических соединений.	3	Д, Т		+			+	
12	ЛПЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarrior	3	Д, Т		+			+	
13	ЛПЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Компьютерная программа GUSAR	3	Д, Т		+			+	
14	ЛПЗ	KNIME. Использование KNIME для создания QSAR моделей. Создания и сравнение классификационных SAR моделей для прогноза мутагенности.	3	Д, Т		+			+	
15	ЛПЗ	Использование KNIME для построения количественных QSAR моделей.	3	Д, Т		+			+	
16	ЛПЗ	Виртуальный скрининг с использованием KNIME и GUSAR (1 часть)	3	Д, Т		+			+	
17	ЛПЗ	Виртуальный скрининг с использованием KNIME и GUSAR (2 часть)	3	Д, Т		+			+	
18	К	Модульный контроль 1	3	Д, Р			+	+	+	
Раздел 2. Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов лекарственных соединений на основе данных о структуре лигандов			16							
19	ЛЗ	Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества	2	Д					+	
20	ЛЗ	Базы данных мишеней лекарственных соединений. Базы данных связей между соединениями, мишенями и заболеваниями.	2	Д					+	
21	ЛПЗ	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества	3	Д, Т		+			+	
22	ЛПЗ	Компьютерная оценка фармакологических и токсических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарства	3	Д, Т		+			+	
23	ЛПЗ	Базы данных мишеней лекарственных соединений. Базы данных связей между соединениями,	3	Д, Т		+			+	

		мишенями и заболеваниями.							
24	К	Модульный контроль 2	3	Д, Р			+	+	+
		Всего за семестр:	64						
3 семестр									
Раздел 3. 3D-QSAR			17						
1	ЛЗ	Моделирование 3D-структур малых молекул.	2	Д					+
2	ЛЗ	Структура и физика белка.	2	Д					+
3	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд	2	Д					+
4	ЛЗ	Фармакофорная и 3D-QSAR + CoMFA/CoMSIA модели.	2	Д					+
5	ЛПЗ	Построение фармакофорной модели и поиск в базе данных	3	Д, Т		+			+
6	ЛПЗ	3D-QSAR с использованием программы Open3DQSAR. PLS	3	Д, Т		+			+
7	ЛПЗ	Построение 3D-QSAR модели и предсказание активности	3	Д, Т		+			+
Раздел 4. Моделирование трехмерной структуры белка			21						
8	ЛЗ	Моделирование трехмерной структуры белка.	2	Д					+
9	ЛЗ	Молекулярная динамика.	2	Д					+
10	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-лиганд.	2	Д					+
11	ЛПЗ	Построение трехмерной структуры белка по методу гомологии (1 часть)	3	Д, Т		+			+
12	ЛПЗ	Построение трехмерной структуры белка по методу гомологии (2 часть)	3	Д, Т		+			+
13	ЛПЗ	Подготовка файлов белка и входных файлов для молекулярной динамики в Amber	3	Д, Т		+			+
14	ЛПЗ	Анализ траектории молекулярной динамики в VMD	3	Д, Т		+			+
15	К	Модульный контроль раздела 3,4	3	Д, Р			+	+	+
Раздел 5. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка			34						
16	ЛЗ	Виртуальный скрининг	2	Д					+
17	ЛЗ	Оптимизация структуры лиганда	2	Д					+
18	ЛПЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock (1 часть)	3	Д,Т		+			+
19	ЛПЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock (2 часть)	3	Д,Т		+			+
20	ЛПЗ	Оптимизация структуры лиганда	3	Д, Т		+			+
21	ЛПЗ	Моделирование 3D структуры мутантного белка (1 часть)	3	Д, Т		+			+
22	ЛПЗ	Моделирование 3D структуры мутантного белка (2 часть)	3	Д, Т		+			+
23	ЛПЗ	Виртуальный скрининг на основе (Q)SAR моделирования и до-	3	Д, Т		+			+

		кинга (проект, 1 часть)							
24	ЛПЗ	Виртуальный скрининг на основе (Q)SAR моделирования и докинга (проект, 2 часть)	3	Д, Т		+			+
25	ЛПЗ	Виртуальный скрининг на основе (Q)SAR моделирования и докинга (проект, 3 часть)	3	Д, Т		+			+
26	ЛПЗ	Виртуальный скрининг на основе (Q)SAR моделирования и докинга (проект, 4 часть)	3	Д, Т		+			+
27	К	Текущий рубежный (модульный) контроль по разделу 5	3	Д, Р				+	+
		Всего за семестр:	72						
28	Э	Промежуточная аттестация	9				+	+	
		Всего по дисциплине:	145						

Виды учебных занятий и формы промежуточной аттестации *

Виды учебных занятий, формы промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
	Лекционное занятие	Лекция
Семинарское занятие	Семинар	СЗ
Практическое занятие	Практическое	ПЗ
Практикум	Практикум	П
Лабораторно-практическое занятие	Лабораторно-практическое	ЛПЗ
Лабораторная работа	Лабораторная работа	ЛР
Клинико-практические занятия	Клинико-практическое	КПЗ
Специализированное занятие	Специализированное	СЗ
Комбинированное занятие	Комбинированное	КЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К
Контрольная работа	Контр. работа	КР
Итоговое занятие	Итоговое	ИЗ
Групповая консультация	Групп. консультация	КС
Конференция	Конференция	Конф.
Защита курсовой работы	Защита курсовой работы	ЗКР
Экзамен	Экзамен	Э

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности на занятиях по теме.
Текущий рубежный (модульный) контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу) дисциплины
Текущий итоговый контроль	Итоговый	И	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам) дисциплины

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся /виды работы обучающихся/ ***

№	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся (ФТКУ) ***	Техническое и сокращённое наименование		Виды работы обучающихся (ВРО) ***	Типы контроля
1	Контроль присутствия (КП)	Присутствие	КП	Присутствие	Присутствие
2	Учет активности (А)	Активность	А	Работа на занятии по теме	Участие
3	Опрос устный (ОУ)	Опрос устный	ОУ	Выполнение задания в устной форме	Выполнение обязательно
4	Опрос письменный (ОП)	Опрос письменный	ОП	Выполнение задания в письменной форме	Выполнение обязательно
5	Опрос комбинированный (ОК)	Опрос комбинированный	ОК	Выполнение заданий в устной и письменной форме	Выполнение обязательно
6	Тестирование в электронной форме (ТЭ)	Тестирование	ТЭ	Выполнение тестового задания в электронной форме	Выполнение обязательно
7	Проверка реферата (ПР)	Реферат	ПР	Написание (защита) реферата	Выполнение обязательно
8	Проверка лабораторной работы (ЛР)	Лабораторная работа	ЛР	Выполнение (защита) лабораторной работы	Выполнение обязательно
9	Подготовка учебной истории болезни (ИБ)	История болезни	ИБ	Написание (защита) учебной истории болезни	Выполнение обязательно
10	Решение практической (ситуационной) задачи (РЗ)	Практическая задача	РЗ	Решение практической (ситуационной) задачи	Выполнение обязательно
11	Подготовка курсовой работы (ПКР)	Курсовая работа	ПКР	Выполнение (защита) курсовой работы	Выполнение обязательно
12	Клинико-практическая работа (КПР)	Клинико-практическая работа	КПР	Выполнение клинико-практической работы	Выполнение обязательно
13	Проверка конспекта (ПК)	Конспект	ПК	Подготовка конспекта	Выполнение обязательно
14	Проверка контрольных нормативов (ПKN)	Проверка нормативов	ПKN	Сдача контрольных нормативов	Выполнение обязательно
15	Проверка отчета (ПО)	Отчет	ПО	Подготовка отчета	Выполнение обязательно
16	Контроль выполнения домашнего задания (ДЗ)	Контроль самостоятельной работы	ДЗ	Выполнение домашнего задания	Выполнение обязательно, Участие
17	Контроль изучения электронных образовательных ресурсов (ИЭОР)	Контроль ИЭОР	ИЭОР	Изучения электронных образовательных ресурсов	Изучение ЭОР

4.2. Содержание самостоятельной работы обучающихся

№ п/п	Период обучения (семестр). Наименование раздела	Содержание самостоятельной работы обучающихся	Всего часов
1	2	3	4
2 семестр			
1.	Хемоинформатика.	Работа с учебниками, учебно-методическими пособиями, подготовка к тестам, решение ситуационных задач, подготовка к защите лабораторных работ, работа с таблицами, электронными демонстрационными материалами	32
2.	Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов лекарственных соединений на основе данных о структуре лигандов	Работа с учебниками, учебно-методическими пособиями, подготовка к тестам, решение ситуационных задач, подготовка к защите лабораторных работ, работа с таблицами, электронными демонстрационными материалами	12
Всего за семестр			44
3 семестр			
3.	3D-QSAR	Работа с учебниками, учебно-методическими пособиями, подготовка к тестам, решение ситуационных задач, подготовка к защите лабораторных работ, работа с таблицами, электронными демонстрационными материалами	9
4.	Моделирование трехмерной структуры белка	Работа с учебными пособиями, научными статьями, подготовка презентаций, подготовка к тестам, работа с таблицами, электронными демонстрационными материалами	9
5.	Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка	Работа с учебными пособиями, научными статьями, подготовка презентаций, подготовка к тестам, работа с таблицами, электронными демонстрационными материалами	18
Всего за семестр			36
5.	Экзамен		27
Итого по дисциплине:			107

5. Организация текущего контроля успеваемости обучающихся

5.1. Оценочные средства текущего контроля успеваемости обучающихся

5.1.1. Условные обозначения:

Типы контроля (ТК)*

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)

Текущий дисциплинирующий контроль	Д
Текущий тематический контроль	Т
Текущий рубежный (модульный) контроль	Р

Типы контроля (ТК)

Тип контроля	Тип оценки	
Выполнение	В	ранговый
Присутствие	П	наличие события

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

5.2. Порядок текущего контроля успеваемости обучающихся (критерии, показатели и порядок текущего контроля успеваемости обучающихся)

Критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

6. Организация промежуточной аттестации обучающихся

2 семестр.

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану – зачет.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:
– на основании семестрового рейтинга обучающихся.

3 семестр.

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану - экзамен.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:
– тестирование, письменный и устный опросы по билетам.
- 3) Перечень тем, вопросов, практических заданий для подготовки к промежуточной аттестации.

Перечень вопросов для подготовки к промежуточной аттестации

- 1 Генерация трехмерных координат
- 2 Рентгеноструктурные данные
- 3 Библиотеки фрагментов
- 4 Преобразование двумерных структур в трехмерные
- 5 Вычислительные методы оптимизации геометрии
- 6 Силовые поля
- 7 Оптимизация геометрии
- 8 Методы минимизации энергии
- 9 Метод скорейшего спуска
- 10 Метод сопряженных градиентов
- 11 Метод Ньютона—Рафсона
- 12 Влияние зарядов и растворителя
- 13 Растворитель как статистический континуум
- 14 Квантово-механические методы
- 15 Неэмпирические (ab initio) методы
- 16 Полуэмпирические методы молекулярных орбиталей
- 17 Комбинированные методы квантовой и молекулярной механики
- 18 Конформационный анализ с помощью методов систематического поиска
- 19 Конформационный анализ методом Монте-Карло
- 20 Конформационный анализ методами молекулярной динамики
- 21 Потенциалы молекулярных взаимодействий
- 22 Молекулярный электростатический потенциал
- 23 Методы расчета частичных атомных зарядов

- 24 Методы расчета МЭП
- 25 Поля молекулярного взаимодействия
- 26 Вычисление полей с помощью программы GRID
- 27 Гидрофобные взаимодействия
- 28 Отображение свойств на молекулярную поверхность
- 29 Фармакофорный поиск
- 30 Методы 3D-QSAR
- 31 Метод CoMFA
- 32 Биологические данные, используемые в 3D-QSAR
- 33 Построение модели CoMFA
- 34 Статистическое качество моделей CoMFA
- 35 CoMSIA
- 36 GRID и GOLPE
- 37 3D-QSAR, основанный на рецепторе
- 38 Надежность моделей 3D-QSAR
- 39 Анализ 3D-QSAR
- 40 Уменьшение числа переменных и регрессия частичных наименьших квадратов
- 41 Валидация 3D-QSAR модели
- 42 Где и как получить информацию о белках
- 43 Принципы организации структуры белков и терминология
- 44 Конформационные свойства белков
- 45 Элементы вторичной структуры белков
- 46 Гомологичные белки
- 47 Моделирование белков по гомологии
- 48 Идентификация и моделирование консервативных областей
- 49 Конструирование переменных областей
- 50 Моделирование боковых цепей
- 51 Метод дистанционной геометрии
- 52 Предсказание вторичной структуры
- 53 Методы протягивания
- 54 Процедуры оптимизации. Уточнение модели. Молекулярная динамика
- 55 Силовые поля для моделирования белков
- 56 Оптимизация геометрии
- 57 Использование молекулярной динамики для уточнения модели
- 58 Обработка сольватированных систем
- 59 Комплексы лигандов и центров связывания
- 60 Валидация моделей белков
- 61 Стереохимическая корректность
- 62 Качество упаковки
- 63 Анализ достоверности укладки
- 64 Свойства белков
- 65 Электростатический потенциал
- 66 Потенциалы взаимодействия
- 67 Гидрофобность
- 68 Виртуальный скрининг и докинг
- 69 Подготовка системы
- 70 Подготовка библиотеки соединений
- 71 Представление белков и лигандов
- 72 Гибкость белка
- 73 Гибкость лиганда
- 74 Алгоритмы докинга

- 75 Методы постепенного конструирования
- 76 Генетические алгоритмы
- 77 Табу-поиск
- 78 Моделирование отжига и метод Монте-Карло
- 79 Методы подгонки формы
- 80 Оценочные функции
- 81 Эмпирические оценочные функции
- 82 Оценочные функции, основанные на силовых полях
- 83 Оценочные функции, основанные на имеющихся данных
- 84 Быстрые оценочные функции
- 85 Фильтрация результатов виртуального скрининга
- 86 Фильтрация по топологическим свойствам
- 87 Фильтрация с помощью консенсусных подходов
- 88 Фильтрация с помощью комбинированных вычислительных процедур
- 89 Фильтрация по химическому разнообразию
- 90 Визуальное фильтрация
- 91 Сравнение различных методов докинга и оценки
- 92 Примеры успешного применения виртуального скрининга
- 93 Области применения и ограничения молекулярного докинга
- 94 Докинг в полярные центры связывания, содержащие молекулы воды
- 95 Докинг в центры связывания, содержащие кофактор
- 96 Влияние таутомерии на результаты докинга
- 97 Рациональная разработка лекарственных веществ методами хемогеномики
- 98 Описание пространства лигандов и мишеней
- 99 Пространство лигандов
- 100 Пространство мишеней
- 101 Пространство лиганд-белковых взаимодействий
- 102 Методы хемогеномики, основанные на информации о лигандах
- 103 Аннотирование библиотек лигандов
- 104 Привилегированные структуры
- 105 Скрининг in silico с использованием данных о лигандах

Экзаменационный билет содержит четыре вопроса (по одному вопросу из каждого раздела).

7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

7.1. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (по периодам освоения образовательной программы) – согласно п. 1.3. настоящей рабочей программы дисциплины.

7.2. Критерии, показатели и порядок промежуточной аттестации обучающихся с использованием балльно-рейтинговой системы. Порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок.

2 семестр

Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме зачёта

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме зачёта проводится на основа-

нии результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре, в соответствии с расписанием занятий по дисциплине, как правило на последнем занятии.

Время на подготовку к промежуточной аттестации не выделяется.

Критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине в форме зачета, а также порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

3 семестр

Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме экзамена:

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме экзамена организуется в период экзаменационной сессии согласно расписанию экзаменов, на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестрах, в которых преподавалась дисциплина и результатов экзаменационного испытания.

Порядок допуска обучающихся к промежуточной аттестации в форме экзамена, критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине в форме экзамена, а также порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

Условные обозначения:

Типы контроля (ТК)**

Типы контроля		Тип оценки
Присутствие	П	наличие события
Выполнение (обязательный контроль)	В	дифференцированный

Структура итогового рейтинга по дисциплине
(заполняется идентично БРС)

Дисциплина	Медицинская биоинформатика и функциональная геномика		
Направление подготовки	06.04.01 Биология		
Семестры	7	8	
Трудоемкость семестров в часах (Тдс)	108	144	
Трудоемкость дисциплины в часах за весь период ее изучения (Тд)	252		
Весовые коэффициенты семестровой рейтинговой оценки с учетом трудоемкости (Крос)	0,4	0,4	
Коэффициент экзаменационного семестрового рейтинга за все семестры изучения дисциплины			0,7
Экзаменационный коэффициент (Кэ)			0,3

Структура промежуточной аттестации в форме экзамена
(заполняется идентично БРС)

Форма промежуточной аттестации	Виды работы*	ТК**	Мах.	Весовой коэффициент, %	Коэффициент одного балла в структуре экзаменационной рейтинговой оценки	Коэффициент одного балла в структуре итогового рейтинга по дисциплине
Экзамен (Э)	Контроль присутствия	П	П			
	Опрос устный	ОУ	В			
	Опрос письменный	ОП	В			

*виды работы, см. условные обозначения в разделе 4.

8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Обучение по дисциплине «Медицинская биоинформатика и функциональная геномика» складывается из контактной работы, включающей лекционные и практические занятия и коллоквиумы, самостоятельной работы и промежуточной аттестации.

Практические занятия проходят в учебных аудиториях и компьютерных классах. В ходе занятий студенты решают ситуационные задачи по проведению товароведческого анализа, включающего приемку товара по количеству и качеству, участвуют в деловых и ролевых играх, а также разбирают конкретные производственные ситуации.

Коллоквиум является важным видом занятия, в рамках которого проводится текущий рубежный, а также текущий итоговый контроль успеваемости студента. При подготовке к коллоквиумам студенту следует внимательно изучить материалы лекций и рекомендуемую литературу, а также проработать практические задачи, которые разбирались на занятиях или были рекомендованы для самостоятельного решения.

Самостоятельная работа студента направлена на подготовку к текущему тематическому, текущему рубежному и текущему итоговому контролю успеваемости. Самостоятельная работа включает в себя проработку лекционных материалов, изучение рекомендо-

ванной по данному курсу учебной литературы, изучение информации, публикуемой в периодической печати и представленной в Интернете.

9. Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины

9.1.1. Основная литература:

№ п/п	Наименование	Автор	Год и место издания	Используется при изучении разделов	Семестр	Количество экземпляров	
						в библиотеке	электронный адрес ресурсов
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Молекулярное моделирование	Х.-Д. Хельтье	Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2015.	3, 4,5	3		http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/mb4x?usr_data=access(2med,0YI8ELM6704SLM6S-X097,ISBN9785996324019,1.lms0ylsqdku.ru.ru)
2	Молекулярное моделирование	Х.-Д. Хельтье	Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2015.	3, 4,5	3	25	
3	Введение в хемоинформатику: Компьютерное представление химических структур: учебное пособие. Ч.1	Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек.	Казанский университет Казань, 2013	все	2	5	
4	Введение в хемоинформатику: Химические базы данных: учебное пособие. Ч.2	Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек.	Казанский университет Казань, 2015	все	2	5	
5	Введение в хемоинформатику: Моделирование "Структура – свойство». учебное пособие. Ч.3	Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек.	Казанский университет Казань, 2015	все	2	5	
6	Введение в хемоинформатику: Методы машинного обучения. учебное пособие. Ч.4	Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек.	Казанский университет Казань, 2016	все	2	5	
7	Введение в хемоинформатику: Информатика химических реакций. учебное пособие. Ч.5	И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек.	Казанский университет Казань, 2016	все	2	5	

9.1.2. Перечень дополнительной литературы

№ п/п	Наименование	Автор	Год и место издания	Используется при изучении разделов	Семестр	Количество экземпляров	
						в библиотеке	на кафедре
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение в биоинформатику	А.Леск	2013 Москва	все разделы	2,3	20	1

9.2 Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины:

1. <http://eor.edu.ru>
2. <http://www.elibrary.ru>
3. ЭБС «Консультант студента» www.studmedlib.ru
4. <http://www.books-up.ru> (электронная библиотечная система);
5. <http://www.biblioclub.ru> (электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» РНИМУ им. Пирогова);
6. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
7. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
8. <http://www.drugbank.ca/>
9. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
10. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>
11. <https://clinicaltrials.gov/>
12. <http://www.chemspider.com/>
13. <http://zinc.docking.org/>
14. <http://www.rlsnet.ru/>
15. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
16. <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
17. <http://bidd.nus.edu.sg/group/drt/dart.asp>
18. <http://www.genome.jp/kegg/>
19. https://mcule.com/apps/1-click-docking/?utm_source=ccl&utm_medium=maillist&utm_campaign=1-click-docking
20. <http://www.way2drug.com>
21. <http://biomolecula.ru/insilico/>

9.3. Перечень информационных и иных образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационно-справочных систем (при необходимости):

1. Автоматизированная образовательная среда университета.
2. Балльно-рейтинговая система контроля качества освоения образовательной программы в автоматизированной образовательной системе университета.
3. Наличием свободно распространяемого установленного программного обеспечения, связанного с разделом биоинформатика.
4. Наличием свободно распространяемого установленного программного обеспечения, связанного с компьютерным конструированием лекарств (KNIME, PyMOL, AutoDock).
5. Microsoft Office Word
6. Microsoft Office Excel.

9.4. Материально – техническое обеспечение дисциплины

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее - сеть «Интернет»), как на территории Университета, так и вне ее.

Электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивает:

- доступ к учебному плану, рабочей программе дисциплины, электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам, указанным в рабочей программе дисциплины;
- формирование электронного портфолио обучающегося, в том числе сохранение его работ и оценок за эти работы.

Помещения представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренные программой специалитета, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения (ноутбуки, мультимедийный проектор, проекционный экран, телевизор, конференц-микрофон, блок управления оборудованием)

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения (состав определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению при необходимости).

Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных в рабочей программе дисциплины, на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину.

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ), в том числе в случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий, к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам, состав которых определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению (при необходимости).

Обучающиеся из числа инвалидов и лиц с ОВЗ обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

Приложения:

1. Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине.
2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.

Заведующий кафедрой

Лагунин А.А.

	Содержание	Стр.
1.	Общие положения	4
2.	Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость	6
3.	Содержание дисциплины	7
4.	Тематический план дисциплины	8
5.	Организация текущего контроля успеваемости обучающихся	13
6.	Организация промежуточной аттестации обучающихся	15
7.	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	17
8.	Методические указания обучающимся по освоению дисциплины	19
9.	Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины	20
	Приложения:	
1)	Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине.	
2)	Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.	