

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
ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова МЗ РФ

УТВЕРЖДЕНО
на заседании кафедры
биоинформатики МБФ
Протокол № 8 от «26» июня 2023 г
зав. кафедрой, д.б.н. Лагунин А.А.

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
по учебной дисциплине**

КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ
06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология
Биолог

Москва 2025

Фонд оценочных средств составлен в соответствии с требованиями ФГОС
специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология, утверждено
на заседании кафедры биоинформатики МБФ Протокол № 8 от «26» июня
2023 г

**ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ
АТТЕСТАЦИИ ПО НАПРАВЛЕНИЮ ПОДГОТОВКИ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»**

основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы специалитета
по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология

| № | Контролируемые разделы дисциплины | Индекс контролируемой компетенции (или её части) | Оценочные средства | Способ контроля |
|---|---|--|--------------------|-----------------|
| 1 | Хемоинформатика | ОПК-6, ОПК-9, ПК-4 | Тестовый контроль | Текущий |
| 2 | Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов лекарственных соединений на основе данных о структуре лигандов. | ОПК-6, ОПК-9, ПК-4 | Тестовый контроль | Текущий |
| 3 | 3D-QSAR. Моделирование трехмерной структуры белка. | ОПК-6, ОПК-9, ПК-4 | Тестовый контроль | Текущий |
| 4 | Компьютерный | ОПК-6, ОПК-9, | Тестовый контроль | Текущий |

| | | | | |
|--|---|------|--|--|
| | поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка | ПК-4 | | |
|--|---|------|--|--|

ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

| № | Индекс компетенции и её содержание | Дескрипторы | | |
|---|---|---|--|--|
| | | знатъ | уметь | владеть практическим опытом (трудовыми действиями): |
| ПК-2. Способен проводить научные исследования в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины. | | | | |
| 1 | ПК-2.ИД1 – Собирает и обрабатывает научную и научно-техническую информацию, в результате чего формулирует проверяемые гипотезы в области молекулярной и клеточной биологии, молекулярной медицины. | Знать основные особенности строения генов и белков Т клеточных рецепторов и МНС. Молекулярные основы формирования иммунного ответа. | Пользоваться основными биоинформационическими онлайн ресурсами и компьютерными программами для проведения компьютерного дизайна антител. | Проведения компьютерного дизайна антител. |
| ПК-4. Способен руководить работами по исследованию лекарственных средств. | | | | |
| 1 | ПК-4.ИД1 – Руководит и управляет доклиническими исследованиями лекарственных | основные идентификаторы и форматы представления структур химических соединений; методы машинного обучения; | применять методами анализа связи «структура-активность» | компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, AutoDock, необходимыми для анализа связи |

| | | | | |
|--|---|---|--|---|
| | препаратов. | основные физико-химические свойства; единицы измерения и виды данных описывающих фармакологические свойства лекарственных соединений | | «структура-активность». |
| 2 | ПК-4.ИД2 – Руководит работами по фармацевтической разработке лекарственных препаратов. | 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 | работать с основными электронными базами-данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности | поиска, хранения и обработки данных, связанных со структурами, биологической активностью и физико-химическими свойствами химических соединений и лекарств |
| ОПК-6 Способен анализировать и интерпретировать результаты своей профессиональной деятельности, предлагать пути их развития и внедрения, представлять их в письменной и устной форме для различных контингентов слушателей согласно нормам, принятым в профессиональном сообществе | | | | |
| 1 | ОПК-6.ИД1 Анализирует интерпретирует результаты своей | основные этапы и методы создания и поиска новых лекарственных веществ. | анализировать проблему поиска новых лекарственных веществ и интерпретировать | анализа проблемы поиска новых лекарственных веществ и интерпретирования |

| | профессиональной деятельности | | полученные результаты | полученных результатов. |
|--|--|---|---|---|
| 2 | <p>ОПК-6.ИД3 Представляет результаты своей работы в письменной и устной форме для различных контингентов слушателей согласно нормам, принятым в профессиональном сообществе</p> | <p>Критерии и характеристики параметров результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</p> | <p>Описывать и представлять результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</p> | <p>Описывания и представления результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</p> |
| <p>ОПК-9 Способен разрабатывать и проводить доклинические исследования и испытания лекарственных средств и биологически активных веществ, биосовместимых и биоразлагаемых материалов, а также гибридных материалов и конструкций для нужд биомедицины и промышленности</p> | | | | |
| 1 | <p>ОПК-9.ИД1 Участвует в разработке методики проведения доклинических исследований и испытания лекарственных средств и биологически активных веществ, биосовместимых и биоразлагаемых</p> | <p>как разрабатывать и содержательно аргументировать стратегию решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p> | <p>разрабатывать и содержательно аргументировать стратегию решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p> | <p>разработки и содержательного аргументирования стратегии решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p> |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | материалов, а также гибридных материалов и конструкций для нужд биомедицины и промышленности | | |
|--|--|--|--|

**КОНТРОЛЬНЫЕ МЕРОПРИЯТИЯ И ПРИМЕНЯЕМЫЕ ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»**

| № | Индекс компетенции | Наименование контрольных мероприятий |
|---|--------------------|---|
| | | Тестирование |
| | | Наименование материалов оценочных средств |
| | | Тестовые задания |
| 1 | ОПК-6 | 1-55 |
| 2 | ОПК-9 | 1-55 |
| 3 | ПК-4 | 1-55 |

**КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ И ИНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ОЦЕНКИ
знаний, умений, навыков, характеризующие этапы формирования
компетенций в процессе освоения по дисциплине
«КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»**

ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

ВЫБЕРИТЕ ОДИН ПРАВИЛЬНЫЙ ОТВЕТ И УКАЖИТЕ ЕГО В ВИДЕ
БУКВЫ НАПРИМЕР: Б

1. Коэффициент Танимoto — это оценка сходства между химическими структурами, чем она выше, тем _____ похожи соединения.

- а) менее
- б) более
- в) одинаково
- г) не похожи

Эталон ответа: б) более

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

2. Чем _____ значение RMSE, тем точнее полученная модель.

- а) больше
- б) меньше
- в) стабильнее
- г) изменчивее

Эталон ответа: б) меньше

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

3. Приемлемым значением критерия качества QSAR моделей является:

- а) RMSE > 0,5
- б) RMSE < 0,5
- в) Q2 обучающей выборки < 0,5
- г) R2 теста < 0,5

Эталон ответа: б) RMSE < 0,5

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

4. Приемлемым значением критерия качества SAR моделей является:

- а) R2 < 0,5
- б) R2 > 0,5
- в) AUC > 0,7
- г) RMSE < 0,7

Эталон ответа: в) AUC > 0,7

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

5. Если R2 = 1, то связь между зависимой и независимыми переменными можно назвать _____.

- а) случайной
- б) функциональной
- в) обратной

г) нелинейной

Эталон ответа: б) функциональной

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

6. В каком интервале находятся значения коэффициента корреляции?

а) $[-1;1]$

б) $[0;1]$

в) $[0; \infty)$

г) $(-\infty; \infty)$

Эталон ответа: а) $[-1;1]$

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

7. Чем _____ значение R^2 , тем точнее полученная модель.

а) больше

б) меньше

в) стабильнее

г) изменчивее

Эталон ответа: а) больше

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

8. Независимые переменные, которые описывают структуру соединения, называются _____.

а) предикторами

б) дескрипторами

в) мишенями

г) переменными

Эталон ответа: б) дескрипторами

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

9. SMILES — это _____ формат представления структуры химического соединения.

а) графический

б) табличный

в) линейный

г) иерархический

Эталон ответа: в) линейный

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

10. Проведение прогноза на тестовой выборке называется _____ модели.

а) обучением

б) валидацией

в) тестированием

г) оптимизацией

Эталон ответа: б) валидацией

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

11. Структурированный текстовый формат для хранения информации о структуре химических соединений и её свойствах:

а) SMILES

б) SDF

в) PDB

г) FASTA

Эталон ответа: б) SDF

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

12. Простейший линейный текстовый формат, используемый для записи структур молекул:

- а) SMILES
- б) SDF
- в) PDB
- г) MOL

Эталон ответа: а) SMILES

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

13. Программа PyMol предназначена для _____ отображения молекул.

- а) графического
- б) табличного
- в) текстового
- г) статистического

Эталон ответа: а) графического

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

14. Раздел Targets базы данных ChEMBL содержит информацию о потенциальных _____.

- а) лигандах
- б) мишениях
- в) дескрипторах
- г) реакциях

Эталон ответа: б) мишениях

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

15. Обязательным критерием химических дескрипторов является _____ от нумерации атомов и связей.

- а) зависимость
- б) независимость
- в) корреляция
- г) функциональность

Эталон ответа: б) независимость

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

16. Чем меньше значение ΔG , тем _____ связывание лиганда и мишени.

- а) слабее
- б) сильнее
- в) обратимее
- г) необратимее

Эталон ответа: б) сильнее

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

17. Коэффициент детерминации (R^2) представляет собой:

- а) долю объясненной дисперсии зависимой переменной
- б) квадрат среднего значения зависимой переменной
- в) сумму всех независимых переменных
- г) сумму всех зависимых переменных

Эталон ответа: а) долю объясненной дисперсии зависимой переменной
Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

18. К методу машинного обучения относят:

- а) коэффициент Танимoto
- б) байесовский подход
- в) ANOVA
- г) SAR

Эталон ответа: б) байесовский подход

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

19. Стандартный текстовый формат для представления пространственной структуры молекул:

- а) SMILES
- б) SDF
- в) PDB
- г) MOL2

Эталон ответа: в) PDB

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

20. В качестве входных данных в программе Autodock используются структуры лиганда и ____.

- а) растворителя
- б) белка
- в) ДНК
- г) мембранны

Эталон ответа: б) белка

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

21. Коэффициент Танимoto представляет собой меру ____ молекул.

- а) активности
- б) сходства
- в) различия
- г) токсичности

Эталон ответа: б) сходства

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

22. В базе данных PubChem содержится порядка 100 ____ соединений.

- а) тысяч
- б) миллионов
- в) миллиардов
- г) триллионов

Эталон ответа: б) миллионов

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

23. Что не входит в анализ ADME свойств?

- а) оценка липофильности
- б) оценка активности
- в) оценка всасывания
- г) оценка метаболизма

Эталон ответа: б) оценка активности

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

24. Программное средство для визуализации и работы с трёхмерными структурами соединений:

- а) PyMol
- б) Autodock
- в) KNIME
- г) ChEMBL

Эталон ответа: а) PyMol

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

25. Autodock является пакетом программных средств, предназначенный для автоматизированного молекулярного _____.

- а) моделирования
- б) докинга
- в) синтеза
- г) анализа

Эталон ответа: б) докинга

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

26. Независимые переменные, которые описывают структуру соединения, называются _____.

- а) предикторами
- б) дескрипторами
- в) мишенями
- г) переменными

Эталон ответа: б) дескрипторами

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

27. SMILES — это ____ формат представления структуры химического соединения.

- а) графический
- б) табличный
- в) линейный
- г) иерархический

Эталон ответа: в) линейный

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

28. Проведение прогноза на тестовой выборке называется _____ модели.

- а) обучением
- б) валидацией
- в) тестированием
- г) оптимизацией

Эталон ответа: б) валидацией

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

29. Чем _____ значение R², тем точнее полученная модель.

- а) больше
- б) меньше
- в) стабильнее
- г) изменчивее

Эталон ответа: а) больше

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

30. Независимые переменные, которые описывают структуру соединения, называются _____.
а) предикторами
б) дескрипторами
в) мишенями
г) переменными

Эталон ответа: б) дескрипторами

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

31. Требование уникальности предполагает, что у молекулы может быть только ____ способ её представления.
а) один
б) два
в) три
г) множество

Эталон ответа: а) один

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

32. Раздел Targets базы данных ChEMBL содержит информацию о потенциальных _____.
а) лигандах
б) мишенях
в) дескрипторах
г) реакциях

Эталон ответа: б) мишенях

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

33. В медицинской химии за порог, разделяющий активные и неактивные соединения, принята величина в ____ nM.
а) 100
б) 500
в) 1000
г) 10000

Эталон ответа: в) 1000

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

34. Чем меньше значение ΔG , тем ____ связывание лиганда и мишени.

- а) слабее
- б) сильнее
- в) обратимее
- г) необратимее

Эталон ответа: б) сильнее

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

35. Выберите преимущество формата SMILES:

- а) Не уникальное описание
- б) Создание уникального представления возможно только с использованием компьютера
- в) Требуется специальное указание ароматических циклов
- г) Легко создается и интерпретируется человеком и компьютером

Эталон ответа: г) Легко создается и интерпретируется человеком и

компьютером

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

36. Выберите недостаток SMILES:

- а) Создается с использованием простых и немногочисленных правил
- б) Не уникальное описание
- в) Легко создается и интерпретируется человеком и компьютером
- г) Занимает мало памяти

Эталон ответа: б) Не уникальное описание

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

37. Стандартный текстовый формат для представления пространственной структуры молекул:

- а) SMILES
- б) SDF
- в) PDB
- г) MOL2

Эталон ответа: в) PDB

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

38. В качестве входных данных в программе Autodock используются структуры лиганда и ____.

- а) растворителя
- б) белка
- в) ДНК
- г) мембранны

Эталон ответа: б) белка

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

39. InChI является ____ представления структуры химического соединения.

- а) программой
- б) базой данных
- в) форматом
- г) методом

Эталон ответа: в) форматом

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

40. SDF содержит информацию о ____ и связанных данных для одного или нескольких соединений.

- а) активности
- б) структуре
- в) токсичности
- г) синтезе

Эталон ответа: б) структуре

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

41. ____ фаза клинических испытаний проводится для определения безопасности препарата.

- а) Первая
- б) Вторая
- в) Третья
- г) Четвертая

Эталон ответа: а) Первая

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

42. Вместе с ADME свойствами исследуются потенциальные _____ эффекты молекулы.

- а) терапевтические
- б) токсические
- в) фармакологические
- г) физические

Эталон ответа: б) токсические

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

43. _____ фаза клинических испытаний проводится для определения оптимальной терапевтической дозы препарата.

- а) Первая
- б) Вторая
- в) Третья
- г) Четвертая

Эталон ответа: б) Вторая

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

44. Независимые переменные, которые описывают структуру соединения, называются _____.

- а) предикторами
- б) дескрипторами
- в) мишенями
- г) переменными

Эталон ответа: б) дескрипторами

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

45. SMILES — это _____ формат представления структуры химического соединения.

- а) графический
- б) табличный
- в) линейный
- г) иерархический

Эталон ответа: в) линейный

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

46. Итогом доклинических испытаний являются предварительные расчеты _____ препарата.

- а) активности
- б) дозы
- в) токсичности
- г) стабильности

Эталон ответа: б) дозы

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

47. Что не входит в анализ ADMET свойств?

- а) оценка канцерогенности
- б) оценка безопасности
- в) оценка дозирования
- г) оценка проходимости через ГЭБ

Эталон ответа: в) оценка дозирования

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

48. В (Q)SAR моделировании в качестве зависимой переменной выступает _____ соединений.

- а) структура
- б) активность
- в) токсичность
- г) растворимость

Эталон ответа: б) активность

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

49. Для валидации (Q)SAR моделей исходную выборку разделяют на _____ и обучающую.

- а) контрольную
- б) тестовую
- в) валидационную
- г) тренировочную

Эталон ответа: б) тестовую

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

50. Для построения (Q)SAR моделей химические соединения описывают с помощью _____.

- а) дескрипторов
- б) предикторов
- в) переменных
- г) коэффициентов

Эталон ответа: а) дескрипторов

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

51. R2 и RSME являются показателями качества _____ моделей.

- а) количественных
- б) качественных
- в) категориальных
- г) классификационных

Эталон ответа: а) количественных

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

52. Чувствительность и специфичность являются показателями качества _____ моделей.

- а) количественных
- б) качественных
- в) регрессионных
- г) прогностических

Эталон ответа: б) качественных

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

53. Результаты прогноза тестовой выборки обычно представляют в виде таблицы _____.

- а) корреляции
- б) сопряженности
- в) регрессии

г) вариации

Эталон ответа: б) сопряженности

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

54. Autodock является пакетом программных средств, предназначенный для автоматизированного молекулярного _____.

а) моделирования

б) докинга

в) синтеза

г) анализа

Эталон ответа: б) докинга

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

55. Многофункциональная платформа с открытым исходным кодом, позволяющая проводить (Q)SAR моделирование:

а) PyMol

б) Autodock

в) KNIME

г) ChEMBL

Эталон ответа: в) KNIME

Компетенция: ОПК-6, ОПК-9, ПК-4

Критерии оценки тестирования обучающихся

| «Отлично» | «Хорошо» | «Удовлетворительно» | «Неудовлетворительно» |
|--|--|--|--|
| Количество положительных ответов 91% и более максимального балла теста | Количество положительных ответов от 81% до 90% максимального балла теста | Количество положительных ответов от 71% до 80% максимального балла теста | Количество положительных ответов менее 70% максимального балла теста |

