

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

«28» июня 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б.1.В.В.5.1 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»

для образовательной программы высшего образования -
программы специалитета
по специальности

06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология

специализация: Биомедицина

Москва 2023 г.

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.5.1 «Компьютерное конструирование лекарств» (Далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология.

Специализация: Биомедицина.

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 заведующего кафедрой Лагунина Алексей Александровича, доктора биологических наук, профессора РАН.

Составители:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Веселовский Александр Владимирович	д-р биол. наук	профессор кафедры биоинформатики МБФ	ФГБНУ НИИ биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича	
2.	Лагунин Алексей Александрович	д-р биол. наук, проф. РАН	Зав. кафедрой биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры (Протокол № 8 от «26» июня 2023 г.).

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Кузиков Алексей Александрович	канд. биол. наук, доцент	и.о. зав. кафедрой биохимии МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена советом медико-биологического факультета, протокол № 7 от «28» июня 2023 г.

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

- 1) Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология (уровень специалитет), утвержденный Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 27.07.2021 № 675 (далее ФГОС3++).
- 2) Общая характеристика образовательной программы.
- 3) Учебный план образовательной программы.
- 4) Устав и локальные акты Университета.

1. Общие положения

1.1. Цель и задачи освоения дисциплины

1.1.1. Формирование системных знаний в области с поиска и создания 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 Б.1.В.В.5.1 «Компьютерное конструирование лекарств» изучается в 8, 9 семестре и относится к обязательной части Блока Б1 Дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие дисциплины: Иностранный язык, Теория вероятности и математическая статистика, Информатика, Общая и неорганическая химия, Органическая химия, Биохимия, Биоинформатика, Молекулярная фармакология.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для успешного освоения следующих дисциплин Основы иммуноинформатик, Клиническая биоинформатика и практик: Преддипломная, НИР.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

8,9 семестр

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины (уровень сформированности индикатора (компетенции))
Общепрофессиональные компетенции	
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	
ОПК-6.ИД1 Анализирует и интерпретирует результаты своей профессиональной деятельности	<p>Знать: основные этапы и методы создания и поиска новых лекарственных веществ.</p> <p>Уметь: анализировать проблему поиска новых лекарственных веществ и интерпретировать полученные результаты</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): анализа проблемы поиска новых лекарственных веществ и интерпретирования полученных результатов.</p>
ОПК-6.ИД3 Представляет результаты своей работы в письменной и устной форме для различных контингентов слушателей согласно нормам, принятым в профессиональном сообществе	<p>Знать: Критерии и характеристики параметров результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</p> <p>Уметь: Описывать и представлять результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): Описывания и представления результатов компьютерного конструирования или поиска новых лекарственных веществ</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	
ОПК-9.ИД1 Участвует в разработке методики проведения доклинических исследований и испытания лекарственных средств и биологически активных веществ, биосовместимых и биоразлагаемых материалов, а также гибридных материалов и конструкций для нужд биомедицины и промышленности	<p>Знать: как разрабатывать и содержательно аргументировать стратегию решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p> <p>Уметь: разрабатывать и содержательно аргументировать стратегию решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): разработки и содержательного аргументирования стратегии решения задач компьютерного конструирования лекарств на основе системного и междисциплинарного подходов.</p>
Профессиональные компетенции	
ПК-4. Способен руководить работами по исследованию лекарственных средств.	
ПК-4.ИД1 – Руководит и управляет доклиническими исследованиями лекарственных препаратов.	<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 практически компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, AutoDock, необходимыми для анализа</p>

ПК-4.ИД2 – Руководит работами по разработке лекарственных препаратов.	– Руководит работами по фармацевтической разработке лекарственных препаратов.	м опытом (трудовыми действиями):	связи «структура-активность»
		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
		Уметь:	работать с основными электронными базами-данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности
Владеть практически м опытом (трудовыми действиями):	поиска, хранения и обработки данных, связанных со структурами, биологической активностью и физико-химическими свойствами химических соединений и лекарств		

2. Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость

Формы работы обучающихся / Виды учебных занятий/ Формы промежуточной аттестации	Всего часов	Распределение часов по семестрам												
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
Учебные занятия														
<i>Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КР), в т.ч.:</i>	162								72	90				
Лекционное занятие (ЛЗ)	36								18	18				
Семинарское занятие (СЗ)														
Практическое занятие (ПЗ)	102								48	64				
Практикум (П)														
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)														
Лабораторная работа (ЛР)														
Клинико-практические занятия (КПЗ)														
Специализированное занятие (СПЗ)														
Комбинированное занятие (КЗ)														
Коллоквиум (К)	9								6	8				
Контрольная работа (КР)														
Итоговое занятие (ИЗ)														
Групповая консультация (ГК)														
Конференция (Конф.)														
Иные виды занятий														
<i>Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.</i>	90								36	54				
Подготовка к учебным аудиторным занятиям	90								36	54				
Подготовка истории болезни														
Подготовка курсовой работы														
Подготовка реферата														
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических заданий проектного, творческого и др. типов)														
Промежуточная аттестация														
<i>Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:</i>														
Зачёт (З)														
Защита курсовой работы (ЗКР)														
Экзамен (Э)	9										9			
<i>Самостоятельная работа обучающихся при подготовке к промежуточной аттестации (СРПА), в т.ч.</i>														
Подготовка к экзамену	27										27			
Общая трудоёмкость дисциплины (ОТД)	в часах: ОТД = КР+СРС+КРПА+СРПА	288							108	180				
	в зачетных единицах: ОТД (в часах):36	8							35	5				

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

8 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1.	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД3 ОПК-9.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	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.	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД3 ОПК-9.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	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.

9 семестр

№ п/п	№ компетенции	Наименование раздела (темы) дисциплины	Содержание раздела (темы) в дидактических единицах
1	2	3	4
1	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД3 ОПК-9.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	3D-QSAR. Моделирование трехмерной структуры белка.	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий. Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск. Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей. Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.
2	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД3 ОПК-9.ИД1 ПК-4.ИД1 ПК-4.ИД2	Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка	Виртуальный скрининг и докинг. Области применения и ограничения молекулярного докинга.

3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися

Тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не

предусмотрено.

4. Тематический план дисциплины

4.1. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем

№ п/п	Виды учебных занятий/ форма промежуточной	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименование разделов (модулей) (при наличии). Порядковые номера и наименование тем (модулей) модулей. Темы учебных занятий.	Количество часов	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации***					
					КП	РЗ	ОУ	ТЭ		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
8 семестр										
1	Тема 1. Хемоинформатика									
1.1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур.	2	Д	+					
1.2	ЛЗ	Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	Д	+					
1.3	ЛЗ	Создание моделей связи «структура-свойство» (часть 1)	2	Д	+					
1.4	ЛЗ	Создание моделей связи «структура-свойство» (часть 2). Конструирование лекарств на основе фрагментов структур. Биоизостеризм.	2	Д	+					
1.5	СЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel	3	Т	+	+				
1.6	СЗ	Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov	3	Т	+	+				
1.7	СЗ	Работа с локальной версией базы данных ChEMBL	3	Т	+	+				
1.8	СЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в DataWarrior. Создание комбинаторных библиотек в DataWarrior.	3	Т	+	+				
1.9	СЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Компьютерная программа GUSAR.	3	Т	+	+				
1.10	СЗ	KNIME. Использование KNIME для создания QSAR моделей.	3	Т	+	+				
1.11	СЗ	Использование KNIME для построения количественных QSAR моделей.	3	Т	+	+				
1.12	СЗ	Анализ связи «структура-свойство». Биоизостеризм.	3	Т	+	+				

1.1 3	К	Коллоквиум по модулю 1	3	Р	+		+	+		
Тема 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов										
2.1	ЛЗ	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, АДМЕ, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	Д	+					
2.2	ЛЗ	Заместители: качественные и количественные аспекты взаимосвязи структура – активность.	2	Д	+					
2.3	ЛЗ	Компьютерная оценка фармакологических эффектов.	2	Д	+					
2.4	ЛЗ	Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Д	+					
2.5	ЛЗ	Репозиционирование лекарств	2	Д	+					
2.6	СЗ	Компьютерная оценка токсических эффектов на основе структуры лекарства.	3	Т	+	+				
2.7	СЗ	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	3	Т	+	+				
2.8	СЗ	Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарства.	3	Т	+	+				
2.9	СЗ	Базы данных мишеней лекарственных соединений.	3	Т	+	+				
2.1 0	СЗ	Виртуальный скрининг и оптимизация с использованием KNIME и GUSAR (часть 1)	3	Т	+	+				
2.1 1	СЗ	Виртуальный скрининг и оптимизация с использованием KNIME и GUSAR (часть 2)	3	Т	+	+				
2.1 2	СЗ	Виртуальный скрининг и оптимизация с использованием KNIME и GUSAR (часть 3)	3	Т	+	+				
2.1 3	СЗ	Виртуальный скрининг и оптимизация с использованием KNIME и GUSAR (часть 4)	3	Т	+	+				
2.1 4	К	Коллоквиум по модулю 2	3	Р	+		+			
Всего за семестр			72							
9 семестр										
3	Тема 3. 3D-QSAR. Моделирование трехмерной структуры белка.									
3.1	ЛЗ	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных	2	Д	+					

		взаимодействий.								
3.2	ЛЗ	Структура белка. Методы получения трехмерной структуры белка. PDB. Структура PDB файла.	2	Д	+					
3.3	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд	2	Д	+					
3.4	ЛЗ	Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.	2	Д	+					
3.5	ЛЗ	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей.	2	Д	+					
3.6	СЗ	Ознакомление с программным комплексом SYBYL.	4	Т	+	+				
3.7	СЗ	Построение моделей низкомолекулярных соединений, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 1)	4	Т	+	+				
3.8	СЗ	Построение моделей низкомолекулярных соединений, поиск конформаций, выравнивание в программе SYBYL (часть 2)	4	Т	+	+				
3.9	СЗ	Создание и поиск фармакофора в базе данных трехмерных структур	4	Т	+	+				
3.1 0	СЗ	Построение 3D-QSAR с CoMFA моделей. (часть 1)	4	Т	+	+				
3.1 1	СЗ	Построение 3D-QSAR с CoMFA моделей. (часть 2)	4	Т	+	+				
3.1 2	СЗ	Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования	4	Т	+	+				
3.1 3	К	Коллоквиум по модулю 3	4	Р	+		+			
4	Тема 4. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка									
4.1	ЛЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени	2	Д	+					
4.2	ЛЗ	Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.	2	Д	+					
4.3	ЛЗ	Компьютерная оптимизация структур лекарственных соединений.	2	Д	+					
4.4	ЛЗ	Расчет энергии связывания в системе белок-лиганд	2	Д	+					
4.5	СЗ	Введение в AutoDock Vina	4	Т	+	+				
4.6	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 1)	4	Т	+	+				
4.7	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 2)	4	Т	+	+				
4.8	СЗ	Моделирование белок-белковых взаимодействий	4	Т	+	+				
4.9	СЗ	Исследование связывания лигандов с мутантными белками	4	Т	+	+				

4.1 0	СЗ	Виртуальный скрининг новых активных соединений с использованием комбинации методов (Q)SAR и докинга (часть 1)	4	Т	+	+				
4.1 1	СЗ	Виртуальный скрининг новых активных соединений с использованием комбинации методов (Q)SAR и докинга (часть 2)	4	Т	+	+				
4.1 2	СЗ	Виртуальный скрининг новых активных соединений с использованием комбинации методов (Q)SAR и докинга (часть 3)	4	Т	+	+				
4.1 3	СЗ	Виртуальный скрининг новых активных соединений с использованием комбинации методов (Q)SAR и докинга (часть 4)	4	Т	+	+				
4.1 4	К	Коллоквиум по модулю 4	4	Р	+		+			
		Всего за семестр:	90							
		Промежуточная аттестация:	9							
		Всего по дисциплине:	171							

Условные обозначения:

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
Групповая консультация	Групп. консультация	КС
Конференция	Конференция	Конф.
Зачёт	Зачёт	З
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

5. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

5.1. Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины

Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения дисциплины – согласно п. 1.3. и содержанием дисциплины – согласно п.3. настоящей рабочей программы дисциплины.

5.2. Формы проведения текущего контроля успеваемости

Текущий контроль успеваемости обучающегося в семестре осуществляется в формах, предусмотренных тематическим планом настоящей рабочей программы дисциплины (см. п. 4.1).

5.3. Критерии, показатели и оценочные средства текущего контроля успеваемости обучающихся

5.3.1. Условные обозначения:

Типы контроля (ТК)*

Типы контроля		Тип оценки
Присутствие	П	наличие события
Участие (дополнительный контроль)	У	дифференцированный
Изучение электронных образовательных ресурсов (ЭОР)	И	наличие события
Выполнение (обязательный контроль)	В	дифференцированный

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, модулю) дисциплины
Текущий итоговый контроль	Итоговый	И	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам, модулям) дисциплины

5.3.2. Структура текущего контроля успеваемости по дисциплине

8 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы						
				ТК*	ВТК**	Max.	Min.	Шаг
Лекционное занятие	ЛЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Практическое занятие	СЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1
		Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
Коллоквиум (1)	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0

		Опрос устный	ОК	В	Р	30	0	1
		Тестирование	ЭТ	В	Р	20	0	1
Коллоквиум (2)	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Опрос устный	ОК	В	Р	30	0	1

9 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы						
				ТК*	ВТК**	Max.	Min.	Шаг
Лекционное занятие	ЛЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
Практическое занятие	СЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
Коллоквиум	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Опрос устный	ОК	В	Р	30	0	1

5.3.3. Весовые коэффициенты текущего контроля успеваемости обучающихся
(по видам контроля и видам работы)

8 семестр

Вид контроля	План %	Исходно		ФТКУ / Вид работы	ТК	План %	Исходно		Кэф.
		Баллы	%				Баллы	%	
Текущий дисциплинирующий контроль	5	26	9,77	Контроль присутствия	П	5	26	9,77	0,19
Текущий тематический контроль	60	160	60,15	Решение практической (ситуационной) задачи	В	60	160	60,15	0,38
Текущий рубежный (модульный) контроль	35	80	30,08	Опрос устный	В	20	60	22,56	0,33
				Тестирование в электронной форме	В	15	20	7,52	0,75
Мах кол. баллов	100	266							

9 семестр

Вид контроля	План %	Исходно		ФТКУ / Вид работы	ТК	План %	Исходно		Кэф.
		Баллы	%				Баллы	%	
Текущий дисциплинирующий контроль	5	27	11,89	Контроль присутствия	П	5	27	11,89	0,19
Текущий тематический контроль	55	160	70,48	Опрос комбинированный	В	55	160	70,48	0,52
Текущий рубежный (модульный) контроль	20	20	8,81	Опрос устный	В	20	20	8,81	1,00
Текущий итоговый контроль	20	20	8,81	Опрос устный	В	20	20	8,81	1,00
Мах кол. баллов	100	227							

5.4. Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины

Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным

настоящей рабочей программой дисциплины (см. п. 5.3.2) подготавливаются кафедрой и объявляются преподавателем накануне проведения текущего контроля успеваемости.

6. Организация промежуточной аттестации обучающихся

8 семестр

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

9 семестр.

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану - экзамен.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:
– устный опрос по билетам, решение ситуационной задачи.
- 3) Перечень тем, вопросов, практических заданий для подготовки к промежуточной аттестации.

Перечень вопросов для подготовки к промежуточной аттестации:

Раздел 1-2. «Хемоинформатика» (2 семестр)

1. Основная догма хемоинформатики.
2. Представления молекул.
3. Основные идентификаторы химических соединений.
4. Цели компьютерного представления химических структур.
5. Линейное представление структур молекул.
6. Топологическое представление структур молекул.
7. Формат SMILES, его преимущества и недостатки.
8. MOL формат, его преимущества и недостатки.
9. Формат InChI, его преимущества и недостатки.
10. Формула Маркуша, его преимущества и недостатки.
11. Виды структурного поиска в химических базах данных.
12. Фингерпринты.
13. Сходство химических соединений. Коэффициент Танимото.
14. “Me-too” подход в конструировании лекарств.
15. База данных PubChem.
16. База данных ChEMBL.
17. База данных DrugBank.
18. База данных ClinicalTrials.gov
19. Понятие “activity cliff”.
20. Что такое (Q)SAR?
21. Качество данных.
22. Предобработка химических структур.
23. Математическая предобработка данных.
24. Дескрипторы химических соединений.
25. OECD принципы валидации QSAR моделей.
26. Методы машинного обучения, используемые для создания QSAR моделей.
27. Валидации QSAR моделей.
28. Правило соотношения количества дескрипторов и структур.
29. Методы отбора дескрипторов.
30. Показатели точности количественных моделей.
31. Показатели точности классификационных моделей.

32. Понятие о биоизостеризме.
33. Влияние заместителей на свойства молекулы.
34. Влияние метильной группы на свойства молекулы.
35. Влияние галогенов на свойства молекулы.
36. Влияние ненасыщенных групп на свойства молекулы.

Разделы 3-4 «Молекулярное моделирование» (3 семестр)

1. Форматы файлов для молекул. Виды представления 3D-структур молекул. Генерация 3D-структур из 2D.
2. Молекулярная механика. Основные термины полей сил.
3. Силы Ван-дер-вальса.
4. Электростатика и частичные атомарные заряды.
5. Конформация молекул и конформационный поиск.
6. Аминокислоты, классификация по свойствам, заряд на молекулах, пептидная связь.
7. Силы, удерживающие структуру белка.
8. Основные вторичные структуры белка.
9. Доменная организация белка, структурная классификация белков.
10. Методы определения 3D-структуры белка.
11. База трехмерных структур макромолекул. Формат файла PDB.
12. Параметры, необходимые для полного описания взаимодействия белок-лиганд.
13. Специфичность, селективность, аффинность, насыщение связывания.
14. Модели взаимодействия белок-лиганд. Силы, участвующие во взаимодействии белок-лиганд.
15. Конформационные изменения при связывании. Кинетика связывания белок-лиганд. Время удержания.
16. Фармакофорная модель.
17. Модель псевдоресептора.
18. 3D-QSAR + CoMFA
19. Какие базы низкомолекулярных соединений используются для виртуального скрининга. Какие преимущества и недостатки у них.
20. Какие фильтры используются для подготовки базы данных низкомолекулярных соединений для виртуального скрининга.
21. Какие методы поиска новых соединений включены в понятие виртуального скрининга.
22. Что такое докинг. Два основных расчетных модуля в программах докинга.
23. Какие типы генерации поз существуют в программах докинга. Как в докинге можно учесть подвижность белка-мишени.
24. Что такое оценочная функция. Какие типы оценочных функций существуют. Почему оценочные функции неточные.
25. Источники базовых соединений. Оптимизация лиганда. Какие модификации базовой структуры используют при оптимизации этой структуры.
26. Пролекарства (Prodrug).
27. Конструирование лекарств de novo.
28. Конструирование лекарств методом, основанном на фрагментах (Fragment-based drug design).
29. На чем основан метод молекулярной динамики.
30. Какие подходы используют для моделирования белка в водном окружении и для ускорения расчетов молекулярной динамики.
31. Какие параметры рассчитывают из траектории молекулярной динамики.
32. Какие компоненты включает энергия Гибса. Как сложно их рассчитывать в системе белок-лиганд.
33. Метод MM-P(G)BSA

34. Метод пертурбации свободной энергии

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

8 семестр

Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме зачёта

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме зачёта проводится на основании 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 (модулю) 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 имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

9 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 (модуль) 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 (модулю) 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 имени 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

Дисциплина	Компьютерное конструирование лекарств		
Направление подготовки	Фундаментальная и прикладная биология		
Семестры	8	9	
Трудоемкость семестров в часах (Тдсі)	108	180	
Трудоемкость дисциплины в часах за весь период ее изучения (Тд)	288		
Весовые коэффициенты семестровой рейтинговой оценки с учетом трудоемкости (Кросі)			
Коэффициент экзаменационного семестрового рейтинга за все семестры изучения дисциплины			0,7
Экзаменационный коэффициент (Кэ)			0,3

Структура промежуточной аттестации в форме экзамена

Форма промежуточной аттестации	Формы текущего контроля успеваемости/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	1	0	0	0
	Опрос устный	ОУ	В	50	100	2	0,6

7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для проведения промежуточной аттестации

Экзаменационные билеты для проведения экзамена по дисциплине

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

Экзаменационный билет № 1

*для проведения экзамена по дисциплине «Компьютерное конструирование лекарств»
по специальности 06.05.02 Фундаментальная и прикладная биология
специализация «Биомедицина»*

1. “Me-too” подход в конструировании лекарств
2. Математическая предобработка данных.
3. 3D-QSAR + CoMFA
4. Аминокислоты, классификация по свойствам, заряд на молекулах, пептидная связь.

Заведующий кафедрой _____ / А.А. Лагунин

8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Освоение обучающимися учебной дисциплины складывается из контактной работы, включающей занятия лекционного типа (лекции) и занятия семинарского типа (семинарские занятия, коллоквиумы), а также самостоятельной работы. Контактная работа с обучающимися предполагает проведение текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Для подготовки к занятиям лекционного типа (лекциям) обучающийся должен:

- внимательно прочитать материал предыдущей лекции;
- ознакомиться с учебным материалом по учебнику, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам с темой прочитанной лекции;
- внести дополнения к полученным ранее знаниям по теме лекции на полях лекционной тетради;
- записать возможные вопросы, которые следует задать преподавателю по материалу изученной лекции.

Для подготовки к занятиям семинарского типа обучающийся должен:

- внимательно изучить теоретический материал по конспекту лекции, учебникам, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам;
- подготовиться к выступлению на заданную тему, если данное задание предусмотрено по дисциплине;
- выполнить письменную работу, если данное задание предусмотрено по дисциплине;
- подготовить доклад, презентацию или реферат, если данное задание предусмотрено по дисциплине.

Самостоятельная работа обучающихся является составной частью обучения и имеет целью закрепление и углубление полученных знаний, умений и навыков, поиск и приобретение новых знаний, выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям, текущему контролю успеваемости и промежуточной аттестации.

Выполнение домашних заданий осуществляется в форме:

- работы с учебной, учебно-методической и научной литературой, электронными образовательными ресурсами (например, просмотр видеолекций или учебных фильмов), конспектами обучающегося: чтение, изучение, анализ, сбор и обобщение информации, её конспектирование и реферирование, перевод текстов, составление профессиональных глоссариев;

- подготовки тематических сообщений и выступлений;
- выполнения письменных контрольных работ.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине осуществляется в ходе проведения отдельного вида занятия – коллоквиума. Текущий контроль включает в себя текущий тематический контроль и текущий рубежный (модульный) контроль.

Для подготовки к текущему тематическому контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по теме занятия или отдельным значимым учебным вопросам, по которым будет осуществляться опрос.

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по наиболее значимым темам и (или) разделам дисциплины в семестре.

Промежуточная аттестация в форме зачета по дисциплине проводится на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре.

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

9.1. Литература по дисциплине:

№ п/п	Автор, название, место издания, издательство, год издания	Наличие литературы в библиотеке	
		Кол. экз.	Электр. адрес ресурса
1	2	3	4
1	Пособия «Введение в хемоинформатику». «Компьютерное представление химических структур», «Химические базы данных» и «Моделирование «структура-свойство». Маджидов Т.И., Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А. 2013, 2015, Казань	20	
2	Молекулярное моделирование [Электронный ресурс] : теория и практика : пер. с англ. / Х.-Д. Хельтье [и др.]. – 3-е изд. (эл.). – Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2015. – 322 с. - Режим доступа: http://marc.rsmu.ru:8020/marcweb2/Default.asp .		http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/mb4x?usr_data=access(2med,0YI8ELM6704SLM6S-X097,ISBN9785996324019,1,1ms0ylsqdku,ru,ru)

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

1. <http://eor.edu.ru> – портал электронных образовательных ресурсов
2. <http://www.elibrary.ru> – сайт научной электронной библиотеки
3. www.studmedlib.ru – сайт электронной библиотеки студента «Консультант студента»
4. <http://mon.gov.ru> – сайт Минобрнауки РФ
5. <http://www.edu.ru/> – библиотека федерального портала «Российское образование» (содержит каталог ссылок на интернет-ресурсы, электронные библиотеки по различным вопросам образования)
6. <http://www.prlib.ru> – сайт Президентской библиотеки
7. <http://www.rusneb.ru> – сайт национальной электронной библиотеки
8. <https://www.r-project.org/> (основной сайт R)
9. <https://cran.r-project.org/> (архив пакетов для статистического анализа данных в R)
10. <http://www.bioconductor.org/> (Bioconductor – архив пакетов R, предназначенных для анализа молекулярно-биологических данных)
11. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
12. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
13. <http://www.drugbank.ca/>
14. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
15. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>
16. <https://clinicaltrials.gov/>
17. <http://www.chemspider.com/>
18. <http://zinc.docking.org/>
19. <http://www.rlsnet.ru/>
20. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
21. <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
22. <http://bidd.nus.edu.sg/group/drt/dart.asp>
23. <http://www.genome.jp/kegg/>
24. https://mcule.com/apps/1-click-docking/?utm_source=ccl&utm_medium=maillist&utm_campaign=1-click-docking
25. <http://www.way2drug.com>
26. <http://biomolecula.ru/insilico/>

9.3. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

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 (RStudio, KNIME, PyMOL, AutoDock).
4. Microsoft Office Word
5. Microsoft Office Excel
6. Adobe Acrobat

9.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения. Оснащение: наборы наглядных электронных материалов по различным разделам дисциплины,

демонстрационные таблицы, презентации лекционного материала, видеофильмы; учебная мебель (столы, стулья), ноутбук, проектор, экран.

Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения (компьютерный класс): рабочее место преподавателя, учебная мебель, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду (компьютеризированные рабочие места).

Помещение для самостоятельной работы обучающихся, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации: учебная мебель (столы, стулья), компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду.

Организация обеспечена 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.

Заведующий кафедрой

А.А. Лагунин

	Содержание	Стр.
1.	Общие положения	4
2.	Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость	7
3.	Содержание дисциплины (модуля)	8
4.	Тематический план дисциплины (модуля)	9
5.	Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)	13
6.	Организация промежуточной аттестации обучающихся	16
7.	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)	18
8.	Методические указания обучающимся по освоению дисциплины (модуля)	20
9.	Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	21