

**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 (Пироговский Университет)**

**Институт биомедицины (МБФ)**

**УТВЕРЖДАЮ**

**Директор Института**

**Прохорчук Егор Борисович**

**Доктор биологических наук,  
Член-корреспондент  
Российской академии наук**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б.1.В.В.05.01 Компьютерное конструирование лекарств  
для образовательной программы высшего образования - программы специалитета  
по специальности**

**30.05.01 Медицинская биохимия  
направленность (профиль)**

**Медицинская биохимия  
Год начала подготовки - 2022**

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.05.01 Компьютерное конструирование лекарств (далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия.

Направленность (профиль): Медицинская биохимия.

Форма обучения: очная.

Составители:

| №,<br>п/п | Фамилия, Имя,<br>Отчество | Учёная степень,<br>звание | Должность | Место работы |
|-----------|---------------------------|---------------------------|-----------|--------------|
|-----------|---------------------------|---------------------------|-----------|--------------|

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

| №<br>п/п | Фамилия, Имя,<br>Отчество | Учёная степень,<br>звание | Должность | Место работы |
|----------|---------------------------|---------------------------|-----------|--------------|
|----------|---------------------------|---------------------------|-----------|--------------|

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры

«Кафедра биоинформатики МБФ»

протокол от «\_\_\_» \_\_\_\_\_ № \_\_\_\_\_

**Зав. кафедрой**

Лагунин Алексей

Александрович

Доктор биологических наук

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена ученым советом

**Директор Института**

Прохорчук Егор Борисович

Доктор биологических наук,

Член-корреспондент

Российской академии наук

« \_\_\_\_\_ »

протокол от «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ № \_\_\_\_\_

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

1. Образовательный стандарт высшего образования ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации по уровню образования специалитет по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия, утвержденный приказом от «29» мая 2020г. № 365 рук.
2. Устав и локальные нормативные акты Университета.
3. Общая характеристика образовательной программы.
4. Учебный план образовательной программы.

© федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации

## **1. Общие положения**

### **1.1. Цель и задачи освоения дисциплины**

1.1.1. Цель: 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 дисциплины:

- Выработать у студентов способности использовать доступные интернет ресурсы для поиска и анализа информации о биологической активности соединений, полученных путем химического и биологического синтеза
- 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
- Углубленное изучение методов компьютерного конструирования лекарств на основе структуры лигандов
- Формировать представлений о компьютерной фармакологии и токсикологии

### **1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Компьютерное конструирование лекарств» изучается в 10 семестре(ах) и относится к части, формируемой участниками образовательного процесса, Блока Б.1 «Дисциплины». Является дисциплиной по выбору.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2.0 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся в рамках образовательной программы должны освоить следующие дисциплины и практики: Органическая химия; Биохимия; Молекулярная фармакология; Теория вероятности и математическая статистика.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для успешного прохождения практик: Преддипломная, НИР.

**1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины**

**10 семестр**

| Код и наименование компетенции                          |                                            |
|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| Код и наименование индикатора<br>достижения компетенции | Планируемые результаты освоения дисциплины |

| Код и наименование компетенции                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                               |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Код и наименование индикатора достижения компетенции                                                                                                                                                                                                                                  | Планируемые результаты освоения дисциплины                                                                                                                                                                                                                    |
| <b>ОПК-6 Способен определять стратегию и проблематику исследований, выбирать оптимальные способы их решения, проводить системный анализ объектов исследования, отвечать за правильность и обоснованность выводов, внедрение полученных результатов в практическое здравоохранение</b> |                                                                                                                                                                                                                                                               |
| ОПК-6.ИД1 Планирует научное исследование.                                                                                                                                                                                                                                             | <b>Знать:</b> Основные подходы, методы и источники данных, используемых в компьютерном конструировании лекарств                                                                                                                                               |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Составлять план для создания (Q)SAR моделей, докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений                                                                                                                                           |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Создания (Q)SAR моделей, проведения докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений.                                                                                                      |
| ОПК-6.ИД2 Анализирует результаты научного исследования.                                                                                                                                                                                                                               | <b>Знать:</b> Основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в компьютерном конструировании лекарств                                                                    |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Качественно и количественно, оценивать статистическую значимость получаемых результатов                                                                                                                                                         |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Навыками использования основных принципов, алгоритмов и методов используемых в компьютерном конструировании лекарств                                                                               |
| ОПК-6.ИД3 Формулирует выводы на основании результатов исследования с оценкой возможности внедрения полученных результатов в практическое здравоохранение.                                                                                                                             | <b>Знать:</b> Основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств; использование информационных компьютерных систем хранящих информацию о структуре и биологической активности веществ. Принципы формулирования выводов проводимых исследований.  |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Самостоятельно формулировать выводы на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.                                                                                                                                 |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Формулирования выводов на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.                                                                                                 |
| <b>ОПК-7 Способен обеспечить информационно-технологическую поддержку в области здравоохранения, применять средства информационно-коммуникационных технологий и ресурсы биоинформатики в профессиональной деятельности, выполнять требования информационной безопасности</b>           |                                                                                                                                                                                                                                                               |
| ОПК-7.ИД1 Применяет современные информационные технологии и специализированное программное обеспечение для решения профессиональных задач.                                                                                                                                            | <b>Знать:</b> Современные компьютерные технологии и методы компьютерного конструирования лекарств.                                                                                                                                                            |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Проводить анализ химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.                                                                                                       |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Анализа химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.                                                                   |
| ОПК-7.ИД2 Осуществляет поиск информации с использованием информационнокоммуникационных технологий и ресурсов биоинформатики для решения задач профессиональной деятельности.                                                                                                          | <b>Знать:</b> Основные базы данных химических соединений, принципы анализа данных, методы и компьютерные программы, применяемые в компьютерного конструирования лекарств.                                                                                     |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Работать с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.                                                                                                             |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Работы с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.                                                                  |
| <b>ПК-3 Способен разрабатывать и выполнять доклинические исследования (испытания) лекарственных средств для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.</b>                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                               |
| ПК-3.ИД3 ПК-3.ИД3 Выбирает статистические методы для обработки результатов доклинического исследования (испытания) лекарственного средства для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.                          | <b>Знать:</b> 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 |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Уметь:</b> Применять методами анализа связи «структура-активность». Оценивать точность полученных моделей и результатов исследований                                                                                                                       |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):</b> Компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, Autodock, необходимыми для анализа связи «структура-активность»                                                                        |



## 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 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|-------------|----------------------------------|
|                                                                                                               |                                        |             | 10                               |
| Учебные занятия                                                                                               |                                        |             |                                  |
| Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КРО), в т.ч.:                                      |                                        | 42          | 42                               |
| Специализированное занятие (СЗ)                                                                               |                                        | 26          | 26                               |
| Лекционное занятие (ЛЗ)                                                                                       |                                        | 12          | 12                               |
| Коллоквиум (К)                                                                                                |                                        | 4           | 4                                |
| Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.:                                                  |                                        | 28          | 28                               |
| Подготовка к учебным аудиторным занятиям                                                                      |                                        | 14          | 14                               |
| Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических задании проектного, творческого и др. типов) |                                        | 14          | 14                               |
| Промежуточная аттестация:                                                                                     |                                        |             |                                  |
| Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:                                 |                                        | 2           | 2                                |
| Зачет (З)*                                                                                                    |                                        | 2           | 2                                |
| Общая трудоемкость дисциплины (ОТД)                                                                           | в часах: ОТД = КРО+СРО+КРПА+СРПА       | 72          | 72                               |
|                                                                                                               | в зачетных елинипах: ОТД (в часах): 36 | 2.00        | 2.00                             |

\* Время для проведения промежуточной аттестации в форме зачёта выделяется в рамках контактной работы (ДВЗ) Проведение промежуточной аттестации в форме зачёта организуется в соответствии с расписанием занятий.

### 3. Содержание дисциплины

#### 3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

##### 10 семестр

| № п /п                                                                              | Шифр компетенции                                                            | Наименование раздела, темы дисциплины                                                                                                   | Содержание раздела и темы в дидактических единицах                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Раздел 1. Хемоинформатика</b>                                                    |                                                                             |                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 1                                                                                   | ОПК-7.ИД1,<br>ОПК-7.ИД2,<br>ОПК-6.ИД1,<br>ОПК-6.ИД2,<br>ОПК-6.ИД3, ПК-3.ИД3 | Тема 1. 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. 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. KNIME |
| <b>Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов</b> |                                                                             |                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 1                                                                                   | ОПК-6.ИД1,<br>ОПК-6.ИД2,<br>ОПК-6.ИД3,<br>ОПК-7.ИД1,<br>ОПК-7.ИД2           | Тема 1. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов                                                              | Компьютерные программы и интернет ресурсы, используемые для оценки фармакологических и физико-химических свойств лекарственно-подобных соединений. Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов и взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка ADME свойств в зависимости от структуры лекарственного вещества.                                                                                                                                                                                                                                                       |
| <b>Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени</b>   |                                                                             |                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 1                                                                                   | ОПК-7.ИД1,<br>ОПК-7.ИД2,<br>ОПК-6.ИД1,<br>ОПК-6.ИД2,<br>ОПК-6.ИД3           | Тема 1. Структура белков. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка. | Методы выравнивания последовательностей. База данных белков UniProt. База данных трехмерных структур белков PDB. Методы и подходы используемые для оценки взаимодействия лигандов с трехмерными структурами белков.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |

#### 3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися

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

#### 4. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем при проведении занятий

| № п/п                                                                                                                                          | Виды учебных занятий* | Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименования разделов (при наличии), тем, учебных занятий                                                                                                                                        | Количество часов контактной работы | Виды текущего контроля успеваемости** | Формы проведения текущего контроля успеваемости*** |    |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------------------|----|----|
|                                                                                                                                                |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       | КП                                                 | ОК | РЗ |
| 1                                                                                                                                              | 2                     | 3                                                                                                                                                                                                                                               | 4                                  | 5                                     | 6                                                  | 7  | 8  |
| <b>10 семестр</b>                                                                                                                              |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| <b>Раздел 1. Хемоинформатика</b>                                                                                                               |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| <b>Тема 1. Хемоинформатика</b>                                                                                                                 |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| 1                                                                                                                                              | ЛЗ                    | Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур.                                                                                                                                      | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  |    |
| 2                                                                                                                                              | ЛЗ                    | Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.                                                                                                                                         | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  |    |
| 3                                                                                                                                              | ЛЗ                    | Создание моделей связи «структура-свойство»                                                                                                                                                                                                     | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  |    |
| 4                                                                                                                                              | СЗ                    | Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel.                                                                         | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 5                                                                                                                                              | СЗ                    | Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarrior                                                                                                                                                      | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 6                                                                                                                                              | СЗ                    | Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov                                                                                                                                                         | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 7                                                                                                                                              | СЗ                    | Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Работа с KNIME. Построение классификационной модели для прогноза мутагенности                                                                                                         | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 8                                                                                                                                              | СЗ                    | Использование KNIME для создания QSAR моделей                                                                                                                                                                                                   | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| <b>Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов</b>                                                            |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| <b>Тема 1. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов</b>                                                              |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| 9                                                                                                                                              | ЛЗ                    | Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, ADME, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества. Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений. | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 10                                                                                                                                             | СЗ                    | Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия. Компьютерная оценка токсических эффектов. Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями.    | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 11                                                                                                                                             | СЗ                    | Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями.                                                                                                                                                       | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 12                                                                                                                                             | К                     | Коллоквиум по разделу 1,2                                                                                                                                                                                                                       | 2                                  | Р                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| <b>Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени</b>                                                              |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| <b>Тема 1. Структура белков. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка.</b> |                       |                                                                                                                                                                                                                                                 |                                    |                                       |                                                    |    |    |
| 13                                                                                                                                             | ЛЗ                    | Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий.                                                                                           | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 14                                                                                                                                             | ЛЗ                    | Взаимодействие белок-лиганд.                                                                                                                                                                                                                    | 2                                  | Д                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 15                                                                                                                                             | СЗ                    | Создание и поиск фармакофора в базе данных трехмерных структур.                                                                                                                                                                                 | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 16                                                                                                                                             | СЗ                    | Исследование связывания лигандов с мутантными белками.                                                                                                                                                                                          | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 17                                                                                                                                             | СЗ                    | Моделирование белок-белковых взаимодействий                                                                                                                                                                                                     | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 18                                                                                                                                             | СЗ                    | Введение в AutoDock Vina                                                                                                                                                                                                                        | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 19                                                                                                                                             | СЗ                    | Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 1)                                                                                                                                                            | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 20                                                                                                                                             | СЗ                    | Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 2)                                                                                                                                                            | 2                                  | Т                                     | 1                                                  | 1  | 1  |
| 21                                                                                                                                             | К                     | Коллоквиум по разделам 3                                                                                                                                                                                                                        | 2                                  | Р                                     | 1                                                  | 1  | 1  |

| №<br>п<br>/п | Виды<br>учебных<br>занятий* | Период обучения (семестр). Порядковые номера и<br>наименования разделов (при наличии), тем, учебных<br>занятий | Количество<br>часов<br>контактной<br>работы | Виды текущего<br>контроля<br>успеваемости** | Формы<br>проведения<br>текущего<br>контроля<br>успеваемости*** |    |    |
|--------------|-----------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|---------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|----|----|
|              |                             |                                                                                                                |                                             |                                             | КП                                                             | ОК | РЗ |
| 1            | 2                           | 3                                                                                                              | 4                                           | 5                                           | 6                                                              | 7  | 8  |
| 22           | 3                           | Итоговое занятие                                                                                               | 2                                           | ПА                                          | 1                                                              | 1  |    |
|              |                             | <b>Всего в семестре</b>                                                                                        | 44                                          |                                             | 21                                                             | 21 | 18 |
|              |                             | <b>Всего по дисциплине</b>                                                                                     | 44                                          |                                             | 21                                                             | 21 | 18 |

(\* , \*\*, \*\*\* смотри условные обозначения)

### Условные обозначения

#### Виды учебных занятий\*

| Виды учебных занятий       | Сокращённое наименование |    |
|----------------------------|--------------------------|----|
| Лекционное занятие         | Лекция                   | ЛЗ |
| Специализированное занятие | Специализированное       | СЗ |
| Коллоквиум                 | Коллоквиум               | К  |

#### Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)\*\*

| Виды текущего контроля<br>успеваемости (ВТК) | Сокращённое<br>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 по теме занятия                      |
| Текущий рубежный контроль                    | Рубежный                    | Р | Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу, модулю) дисциплины |

#### Формы проведения текущего контроля успеваемости обучающихся \*\*\*

| № | Формы проведения текущего контроля<br>успеваемости обучающихся (ФПТКУ) | Техническое и<br>сокращённое<br>наименование |    | Возможность проведения текущего<br>контроля успеваемости по видам<br>контроля |   |   |
|---|------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|----|-------------------------------------------------------------------------------|---|---|
|   |                                                                        |                                              |    | Д                                                                             | Т | Р |
| 1 | Контроль присутствия                                                   | Присутствие                                  | КП | +                                                                             |   |   |
| 2 | Опрос комбинированный                                                  | Опрос<br>комбинированный                     | ОК |                                                                               |   | + |
| 3 | Решение практической (ситуационной)<br>задачи                          | Практическая<br>задача                       | РЗ |                                                                               | + |   |

## 5. Промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине Оценочные средства промежуточной аттестации

### 5.1. Формы промежуточной аттестации

| Семестр    | Форма промежуточной аттестации**** | Форма проведения промежуточной аттестации   |
|------------|------------------------------------|---------------------------------------------|
| 1          | 2                                  | 3                                           |
| 10 семестр | Зачет                              | Контроль присутствия, Опрос комбинированный |

#### Условные обозначения \*\*\*\*

| Формы промежуточной аттестации | Сокращённое наименование |
|--------------------------------|--------------------------|
| Зачет                          | Зачет 3                  |

### 5.2 Критерии выставления оценок

#### Критерии выставления оценок при прохождении промежуточной аттестации в форме зачета

##### 10 семестр

| Шкала оценивания | Критерии выставления оценок                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| «зачтено»        | Выполнение индивидуального практического задания в полном объёме. В ходе защиты индивидуального практического задания демонстрирует удовлетворительные знания принципов использования данных, полученных в исследованиях активности химических соединений, а также основных алгоритмов и программ, используемых для работы с данными о свойствах и структуре химических соединений; В ходе ответа на теоретические вопросы демонстрирует удовлетворительные знания в области поиска потенциальных лекарственных соединений, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения. |
| «не зачтено»     | Невыполнение индивидуального практического задания в полном объёме. В ходе защиты индивидуального практического задания демонстрирует полное незнание принципов использования данных, полученных в исследованиях активности химических соединений, а также основ алгоритмов и программ, используемых для работы с данными о свойствах и структуре химических соединений; В ходе ответа на теоретические вопросы демонстрирует неумение постановки задач в области поиска потенциальных лекарственных соединений, не обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения.         |

## 6. Структура рейтинга по дисциплине

**6.1. Обучающийся имеет право пройти промежуточную аттестацию по дисциплине или её части на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине в соответствующем семестре.**

**6.2. Критерии, показатели проведения текущего контроля успеваемости с использованием балльно-рейтинговой системы (по семестрам и формам промежуточной аттестации)**

Рейтинг по дисциплине рассчитывается по результатам текущей успеваемости обучающегося. Тип контроля по всем формам контроля дифференцированный, выставляются оценки по шкале: "неудовлетворительно", "удовлетворительно", "хорошо", "отлично". Исходя из соотношения и количества контролей, рассчитываются рейтинговые баллы, соответствующие системе дифференцированного контроля.

### 10 семестр

| Виды занятий                          |    | Формы проведения текущего контроля успеваемости |    | Кол-во контролей | Макс. кол-во баллов | Соответствие оценок рейтинговым баллам |     |      |      |        |
|---------------------------------------|----|-------------------------------------------------|----|------------------|---------------------|----------------------------------------|-----|------|------|--------|
|                                       |    |                                                 |    |                  |                     | ТК                                     | ВТК | Отл. | Хор. | Удовл. |
| Специализированное занятие            | СЗ | Решение практической (ситуационной) задачи      | РЗ | 13               | 312                 | В                                      | Т   | 24   | 16   | 8      |
| Коллоквиум                            | К  | Опрос комбинированный                           | ОК | 2                | 702                 | В                                      | Р   | 351  | 234  | 117    |
| Сумма баллов по дисциплине за семестр |    |                                                 |    |                  | 1014                |                                        |     |      |      |        |

**Критерии выставления оценок при прохождении промежуточной аттестации в форме зачета (на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине (модулю) или её части в семестре)**

### 10 семестр

| Шкала оценивания | Критерии выставления оценки                                                                                                                                                                                       |
|------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| «зачтено»        | Рейтинговый балл — не менее 60 % (не менее 600 баллов)<br>и<br>Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре                                         |
| «не зачтено»     | Рейтинговый балл — менее 60 % (менее 600 баллов)<br>и/или<br>Получение оценки ниже «удовлетворительно» за прохождение хотя бы одного текущего рубежного контроля в семестре или не прохождение рубежного контроля |

## **7. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

### **10 семестр**

#### **Перечень практических умений и навыков для подготовки к промежуточной аттестации в форме зачёта**

##### **Практическое задание:**

В качестве основного практического задания будет необходимо в DataWarrior на основе данных из ChEMBL создать SD файл, а потом в KNIME построить workflow для одной из мишеней с использованием, которого необходимо объединить данные для дубликатов структур, перевести значения IC50 из нМ в молярные значения вида pIC50, разделить выборку на обучающую и тестовую выборки в отношении 70:30 и сохранить выборки в SD файлах с информацией о структурах и pIC50. На основе созданных выборок построить количественную зависимость «структура-активность» в GUSAR и оценить точность модели на тестовой выборке (рассчитать R<sup>2</sup> и RMSE). На основе полученной модели отобрать самое активное вещество из предоставленной в виде SD файла выборки образцов коммерчески доступных химических соединений. Провести поиск отобранного вещества в PubChem на идентичность и сходство. Ответить на вопрос известна ли прогнозируемая активность у найденного соединения или у похожих соединений по экспериментальным данным или патентам. В процессе выполнения задания необходимо сохранить в файле Word количественные характеристики построенной QSAR модели, посчитанные R<sup>2</sup> и RMSE, наиболее активное по прогнозу соединение (его структуру, идентификатор в базе данных образцов коммерчески доступных химических соединений и PubChem, названия мишеней, с которыми данное соединение или его аналоги активно взаимодействуют).

## Образец билета для проведения зачета

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

Кафедра биоинформатики МБФ

Билет № \_\_\_\_\_

для проведения зачета по дисциплине «Компьютерное конструирование лекарств» по программе специалитета по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия направленность (профиль) Медицинская биохимия

Практическое задание:

В качестве основного практического задания будет необходимо в DataWarrior на основе данных из ChEMBL создать SD файл, а потом в KNIME построить workflow для одной из мишеней с использованием, которого необходимо объединить данные для дубликатов структур, перевести значения IC<sub>50</sub> из нМ в молярные значения вида pIC<sub>50</sub>, разделить выборку на обучающую и тестовую выборки в отношении 70:30 и сохранить выборки в SD файлах с информацией о структурах и pIC<sub>50</sub>. На основе созданных выборок построить количественную зависимость «структура-активность» в GUSAR и оценить точность модели на тестовой выборке (рассчитать R<sup>2</sup> и RMSE). На основе полученной модели отобрать самое активное вещество из предоставленной в виде SD файла выборки образцов коммерчески доступных химических соединений. Провести поиск отобранного вещества в PubChem на идентичность и сходство. Ответить на вопрос известна ли прогнозируемая активность у найденного соединения или у похожих соединений по экспериментальным данным или патентам. В процессе выполнения задания необходимо сохранить в файле Word количественные характеристики построенной QSAR модели, посчитанные R<sup>2</sup> и RMSE, наиболее активное по прогнозу соединение (его структуру, идентификатор в базе данных образцов коммерчески доступных химических соединений и PubChem, названия мишеней, с которыми данное соединение или его аналоги активно взаимодействуют).

Кафедра биоинформатики МБФ

Заведующий кафедрой  
Лагунин Алексей  
Александрович  
Доктор биологических наук

## **8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины**

### **Методические указания для подготовки к занятиям лекционного типа**

Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины подготавливаются кафедрой и объявляются преподавателем накануне проведения текущего контроля успеваемости.

### **Методические указания для подготовки к занятиям специализированного типа**

внимательно изучить теоретический материал по конспекту лекции, учебникам, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам

### **Методические указания для подготовки к коллоквиуму (текущий рубежный контроль)**

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

### **Методические указания для подготовки к зачету**

1. Ознакомиться с примером билета, выносимого на промежуточную аттестацию в форме зачета;

2. Проанализировать материал и наметить последовательность его повторения;

3. Определить наиболее простые и сложные темы и (или) разделы дисциплины;

4. Повторить материал по наиболее значимым/сложным темам и (или) разделам дисциплины по конспектам и учебной литературе, а также электронным образовательным ресурсам.

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

### 9.1. Перечень литературы по дисциплине:

| № п /п | Наименование, автор, год и место издания                                                         | Рекомендуется при изучении разделов дисциплины                                                                                                      | Количество экземпляров в библиотеке | Электронный адрес ресурса |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------|
| 1      | 2                                                                                                | 3                                                                                                                                                   | 4                                   | 5                         |
| 1      | Химические базы данных. Введение в хемоинформатику: учебное пособие, Маджидов Т. И., 2024 - 2025 | Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов Хемоинформатика Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени | 80                                  |                           |

### 9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе профессиональных баз данных, необходимых для освоения дисциплины

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе профессиональных баз данных, необходимых для освоения дисциплины отсутствует.

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

1. MS Windows в редакциях: 7 Pro, 10 Pro, 11 Pro (x86, x64) – лицензия бессрочно
2. MS Office в редакциях: «Standard», «Professional Plus» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
3. MS Visio в редакциях: «Professional» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
4. Astra Linux Special Edition, вариант лицензирования «Орел», РУСБ.10015-10 – лицензия бессрочно
5. Adobe Acrobat Reader – свободно распространяемое ПО
6. Гарант (справочная правовая система) – лицензия до 31.07.2027
7. FastStone Image Viewer – свободно распространяемое ПО
8. Яндекс Браузер для организаций – свободно распространяемое ПО
9. Платформа «1С:Предприятие 8», конфигурации «1С:Документооборот государственного учреждения», «1С:Университет ПРОФ», «1С:Медицина» – лицензия бессрочно
10. Единая цифровая образовательная среда РНИМУ им. Н.И. Пирогова – собственная разработка РНИМУ
11. МТС Линк платформа для проведения вебинаров – лицензия до 04.07.2027 г.
12. Антивирус Kaspersky endpoint Security – лицензия до 19.09.2027 г.
13. Архиватор 7-Zip – свободно распространяемое ПО
14. Платформа «Kinescore» - лицензия до 11.03.2027 г.
15. Система управления обучением (LMS) – лицензия бессрочная
16. Ubuntu – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
17. Debian – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
18. KNIME
19. AutoDock Vina
20. DataWarrior

#### 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.

Университет располагает следующими видами помещений и оборудования для материально-технического обеспечения образовательной деятельности для реализации образовательной программы дисциплины:

| № п /п | Наименование оборудованных учебных аудиторий                                                                                                                                                                       | Перечень специализированной мебели, технических средств обучения                                                                                                                   |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1      | Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения                                                                                                                                               | Компьютер персональный, Стулья, Столы, Проектор мультимедийный, Экран для проектора, Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет», Компьютеры для обучающихся |
| 2      | 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         |
| 3      | Учебная аудитория для проведения промежуточной аттестации                                                                                                                                                          | Учебная мебель (столы и стулья для обучающихся), стол, стул преподавателя, персональный компьютер; набор демонстрационного оборудования (проектор, экран, колонки)                 |

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 обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.