

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Компьютерное моделирование в дизайне биологически активных веществ

Код модуля
1161181(1)

Модуль
Молекулярное моделирование в разработке
инновационных лекарственных средств и
перспективных материалов

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Безматерных Максим Алексеевич	кандидат химических наук, доцент	Доцент	технологии органического синтеза
2	Буторин Илья Игоревич	без ученой степени, без ученого звания	Старший преподаватель	Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий
3	Даринцева Анна Борисовна	кандидат химических наук	доцент	технологии электрохимических производств
4	Таня Ольга Сергеевна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	органической и биомолекулярной химии

Согласовано:

Управление образовательных программ

С.А. Иванченко

Авторы:

- **Буторин Илья Игоревич, Старший преподаватель, Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий**
- **Тания Ольга Сергеевна, Доцент, органической и биомолекулярной химии**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Компьютерное моделирование в дизайне биологически активных веществ

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Практические/семинарские занятия Лабораторные занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	1
		Коллоквиум	1
		Отчет по лабораторным работам	3

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Компьютерное моделирование в дизайне биологически активных веществ

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-7 -Способен планировать и управлять жизненным циклом инженерных продуктов и технических объектов, включая стадии замысла, анализа требований, проектирования, изготовления, эксплуатации, поддержки,	Д-1 - Проявлять настойчивость в достижении цели; Внимательность; Аналитические умения З-1 - Изложить принципы имитационного моделирования для принятия инженерных решений З-3 - Перечислить принципы и возможные ролевые модели управления командой инженерного проекта П-1 - Освоить практики построения и применения	Коллоквиум Контрольная работа Практические/семинарские занятия Экзамен

<p>модернизации, замены и утилизации</p>	<p>имитационных моделей в процессе проектирования</p> <p>П-3 - Формализовать и согласовывать требования, относящиеся к внешним условиям (эксплуатации, сопровождения, хранения, перевозки, вывода из эксплуатации)</p> <p>П-4 - Разработать технические задания на проектирование и изготовление инженерных продуктов и технических объектов, включая выбор оборудования и технологической оснастки</p> <p>У-1 - Формулировать инженерные задачи с учетом формализованных требований</p> <p>У-3 - Использовать программные пакеты при построении имитационной модели разрабатываемой системы или использующей системы</p> <p>У-4 - Выбрать оборудование и технологическую оснастку при разработке технических заданий на проектирование и изготовление инженерных продуктов и технических объектов</p>	
<p>ОПК-4 -Способен разрабатывать технические объекты, системы и технологические процессы в своей профессиональной деятельности с учетом экономических, экологических, социальных ограничений</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать креативное мышление, творческие способности</p> <p>З-1 - Объяснить основные принципы функционирования разрабатываемых технических объектов, систем, технологических процессов</p> <p>З-3 - Привести примеры сравнения предложенных решений с мировыми аналогами</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов в своей профессиональной</p>	<p>Коллоквиум</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

	<p>деятельности с учетом экономических, экологических, социальных ограничений</p> <p>У-1 - Предложить нестандартные варианты разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов</p> <p>У-4 - Провести всесторонний анализ принятых инженерных решений для выполнения разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов</p>	
<p>ОПК-5 -Способен планировать, организовывать и контролировать работы по созданию, установке и модернизации технологического оборудования и технологических процессов в сфере своей профессиональной деятельности</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать требовательность и принципиальность в процессе контроля выполнения заданий</p> <p>З-1 - Изложить основные нормы и правила, регламентирующие работы по созданию, установке и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем</p> <p>З-3 - Перечислить основные разделы документов (технического задания, технических условий и т.п.), в соответствии с которыми выполняются работы по созданию, установке и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем</p> <p>З-4 - Показать возможности использования цифровых технологий (создание цифровых двойников) для оптимизации работы по созданию, установке и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем</p>	<p>Контрольная работа</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 1</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 2</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 3</p> <p>Экзамен</p>

	<p>П-1 - Самостоятельно составить план работ в целом по этапам создания, установки и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем либо отдельных этапов этой работы</p> <p>У-1 - Обосновать детальный план проведения работ по созданию, установке и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем</p> <p>У-2 - Анализировать задания, распределять и объяснять их работникам коллектива при выполнении работ по созданию, установке и модернизации оборудования, технологических процессов и информационных систем</p> <p>У-4 - Использовать при необходимости техники цифрового моделирования при выполнении работ по созданию, установке и модернизации технологического оборудования, технологических процессов и информационных систем</p>	
<p>ОПК-6 -Способен планировать и организовать работы по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов в сфере своей профессиональной деятельности с учетом энерго- и ресурсоэффективност и производственного цикла и продукта</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать ответственное отношение к работе, организаторские способности</p> <p>З-1 - Перечислить основные технические параметры и технологические характеристики эксплуатируемого оборудования и реализуемых технологических процессов</p> <p>З-2 - Назвать имеющиеся ограничения режимов эксплуатации оборудования и регламенты технологических процессов</p>	<p>Коллоквиум</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 1</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 2</p> <p>Отчет по лабораторным работам № 3</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

	<p>П-1 - Организовать в соответствии с разработанным утвержденным планом выполнение работ по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов в сфере своей профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Технически грамотно формулировать задания по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов с учетом имеющихся ограничений режимов эксплуатации оборудования и регламенты технологических процессов</p> <p>У-2 - Оценивать ход эксплуатации технологического оборудования и реализации технологических процессов на основании визуального анализа и показаний контрольно-измерительной аппаратуры</p>	
<p>ПК-4 -Способен осуществлять поиск научно-технической информации о существующих лекарственных формах и сырье для их производства и разрабатывать рецептуру нового лекарственного средства (Живые системы. Перспективные химико-фармацевтические и биотехнологии: исследования и разработки)</p>	<p>З-3 - Изложить теоретические основы физико-химических методов анализа с использованием современных мультимедийных материалов</p> <p>П-2 - Осуществлять обоснованный выбор современных методов создания БАВ, включая атомэкономные приемы</p> <p>П-3 - Структурировать научный поиск при синтезе новых биоорганических соединений</p> <p>П-4 - Использовать методы литературного поиска новой информации, с привлечением современных Internet технологий</p> <p>У-2 - Анализировать альтернативные варианты синтеза биологически активных соединений</p> <p>У-3 - Выбирать методы и приборы при разработке и контроле качества</p>	<p>Коллоквиум</p> <p>Контрольная работа</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

	лекарственных средств исходя из структуры вещества	
ПК-13 -Способен разрабатывать проекты биотехнологического производства с учетом внедрения инновационных энергосберегающих технологий (Живые системы. Перспективные химико-фармацевтические и биотехнологии: исследования и разработки)	<p>З-3 - Представлять основные химические, физические и технические аспекты промышленного производства лекарственных веществ с учетом сырьевых и энергетических затрат</p> <p>З-4 - Изложить современное состояние и перспективы развития технологии лекарственных веществ"</p> <p>З-5 - Привести стратегии создания новых лекарственных препаратов</p> <p>П-1 - Разрабатывать технологическую документацию в связи с оптимизацией и совершенствованием технологического процесса получения лекарственных веществ</p> <p>П-2 - Разрабатывать новые пути получения лекарственных веществ</p> <p>П-3 - Производить анализ существующего процесса производства лекарственных средств для определения возможных решений его оптимизации</p> <p>У-2 - Анализировать отечественный и зарубежный опыт в области технологий получения лекарственных веществ</p> <p>У-3 - Распознавать структурные фрагменты в молекулах органических соединений, определяющие их фармакологическое действие</p> <p>У-4 - Выбирать оптимальные химические технологии получения лекарственных веществ"</p> <p>У-5 - Прогнозировать биологическую активность исходя из химической структуры вещества</p>	<p>Коллоквиум</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

--	--	--

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лекциям – нет Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – не предусмотрено		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.6		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>контрольная работа</i>	3,7	20
<i>практическая работа 1</i>	3,15	40
<i>практическая работа 2</i>	3,16	40
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 0.5		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – экзамен Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – 0.5		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.4		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	3,9	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	3,11	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	3,13	20
<i>коллоквиум</i>	3,15	40
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – 1		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – нет Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		

4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Drug design: современные методы разработки лекарств и историческая ретроспектива
2. Компьютерное представление химической информации
3. Дескрипторы
4. Введение в анализ данных
5. Лиганд-ориентированный дизайн лекарств: моделирование «структура-свойство»
6. Методы биоинформатики
7. Молекулярное моделирование

8. Молекулярный докинг
9. Молекулярная динамика

Примерные задания

1. Выбрать алгоритм докинга из представленных
 - a) BFGS
 - b) BLAST
 - c) Glide
 - d) AScore
2. Определить показатель, используемый для валидации выбранных параметров докинга
 - a) Корреляция рассчитанного значения docking score с реальным показателем биологической активности нативного лиганда;
 - b) RMSD для нативной структуры после её редокинга в данном комплексе;
 - c) Среднее значение RMSD для всех лигандов в бенчмаркинг наборе CASF-2016;
 - d) Docking score нативной структуры после/до редокинга
3. Выбрать дескрипторы, которые относятся к топологическим из представленных :
 - a) Молекулярные отпечатки Моргана
 - b) Молекулярный вес
 - c) TPSA
 - d) Логарифм липофильности
4. Выбрать ансамбли в молекулярной динамике:
 - a) BLAST, BFGS
 - b) NT, NPT
 - c) Ascore, FlexX
 - d) NVT, NPT
5. Продолжить определение «гидрофобных взаимодействий». Это ...
 - a) Взаимодействия, возникающие на расстоянии не более 3,5Å между электрон-акцепторным атомом одного фрагмента и атомом водорода в другом фрагменте
 - b) Электростатические взаимодействия между частицами с противоположными зарядами
 - c) Взаимодействия между π-системами двух молекул/фрагментов, возникающие при взаимном перекрытии их p-орбиталей
 - d) Взаимодействия, возникающие между гидрофобными/неполярными фрагментами молекул в водных средах

LMS-платформа – не предусмотрена

5.1.2. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Поиск по подобию в БД ChEMBL по молекулярным отпечаткам и фармакофорному представлению малых молекул
 2. Разработка QSAR модели прогноза активности малых молекул
 3. Молекулярный докинг малых молекул в отношении белка-мишени
- LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа

Примерный перечень тем

1. Способы компьютерного представления информации о строении малых молекул
2. Оценка качества регрессионных и классификационных QSAR моделей
3. Белок-лигандные взаимодействия
4. Основные алгоритмы поиска и оценочные функции в молекулярном докинге
5. Ансамбли в молекулярной динамике
6. Оценка результатов молмоделирования

Примерные задания

Дать письменные ответы (на 1-2 стр) по темам.

1. Белки. Классификация. Строение. Функции.
2. Регуляция биохимических процессов при белок-лигандных взаимодействиях.

Примеры.

3. Типы оценочных функций в молекулярном докинге. Понятие docking score.
4. Типы алгоритмов поиска в молекулярном докинге.
5. Выравнивание белков.
6. Принципиальная схема проведения молекулярной динамики белка. Выбор ансамблей. Отжиг.
7. Валидация метода молекулярного докинга. Бенчмаркинг. RMSD.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Коллоквиум

Примерный перечень тем

1. Мишень-ориентированная разработка БАВ
2. Лиганд-ориентированная разработка БАВ
3. Компьютерное представление химической информации
4. Машинное обучение в медицинской химии
5. Поиск и моделирование биологических объектов
6. Задачи биоинформатики

Примерные задания

Раскрыть тему (в виде устного ответа).

1. Поиск по подобию. Индексы подобия и различия.
2. Бинарные дескрипторы. Молекулярные отпечатки и структурные ключи.
3. Классификационные методы машинного обучения.
4. Кластеризация в машинном обучении.
5. Регрессионные методы машинного обучения.
6. Нейросети в разработке лекарств.
7. Инструменты прогноза биологической активности.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.3. Отчет по лабораторным работам № 1

Примерный перечень тем

1. Поиск по подобию в БД ChEMBL по молекулярным отпечаткам и фармакофорному представлению малых молекул

Примерные задания

Создание БД биологически активных молекул на основе данных из ChEMBL в ПО DataWarrior. Осуществление поиска по подобию внутри разработанной БД. Анализ и сравнение результатов поиска по фармакофорному и структурному подобию.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.4. Отчет по лабораторным работам № 2

Примерный перечень тем

1. Разработка QSAR модели прогноза активности малых молекул

Примерные задания

Создание выборки химических объектов с известной активностью. Подготовка данных. Обучение и валидация модели машинного обучения в KNIME. Анализ результатов: оценка качества моделирования.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.5. Отчет по лабораторным работам № 3

Примерный перечень тем

1. Молекулярный докинг малых молекул в отношении белка-мишени определенной патологии

Примерные задания

Создание химических объектов для прогноза биологической активности. Выбор белка-мишени. Валидация параметров докинга. Молекулярный докинг и анализ результатов: 2D-карты нековалентных взаимодействий, свободная энергия связывания, сравнение позиций нативного лиганда и рассчитанных химических объектов.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. LBDD подход в разработке лекарств
2. SBDD подход в разработке лекарств
3. Форматы хранения данных о структуре химических объектов
4. Методы машинного обучения
5. Способы представления химической информации
6. Дескрипторы 2D-структуры и 2D/3D фармакофоры. Практика применения
7. Молекулярные отпечатки. Алгоритм Моргана
8. Построение QSPR-модели. Стандартизация и нормализация данных
9. Выравнивание последовательностей. Алгоритм Нидлмана-Вунша. BLAST
10. Проблема фолдинга белков и инструменты для решения

LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.