

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**ФИЛИАЛ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКИЙ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА»
В ГОРОДЕ ТАШКЕНТЕ (РЕСПУБЛИКА УЗБЕКИСТАН)**

«УТВЕРЖДАЮ»

Исполнительный директор

_____/ Б.Э. Нурматов
(подпись) И.О. Фамилия

« ____ » _____ 2024 г.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

«Хемоинформатика»

направление подготовки
18.04.01 Химическая технология

магистерская программа
Химическая технология биологически активных веществ

форма обучения:
очная

Квалификация: магистр

Ташкент 2024

1. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПРОЦЕДУРУ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1.1 Положение о рейтинговой системе оценки качества учебной работы студентов в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятое решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 26.02.2020 г., протокол № 8, введенное в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 20.03.2020 г. № 27 ОД;

1.2 Порядок разработки и утверждения образовательных программ федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденный решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.09.2022, протокол № 2, введенный в действие приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.11.2022 № 176 ОД;

1.3 Положение об организации и использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий при реализации образовательных программ в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятое решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 27.03.2020 г., протокол № 9, введенное в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 27.03.2020 г. № 29 ОД.

2. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

2.1. Для студентов, обучающихся без использования дистанционных образовательных технологий

Методические рекомендации по организации учебной работы обучающегося в магистратуре направлены на повышение ритмичности и эффективности его аудиторной и самостоятельной работы по дисциплине.

Дисциплина «Хемоинформатика» включает 5 разделов, каждый из которых имеет определенную логическую завершенность. При изучении материала каждого раздела рекомендуется регулярное повторение законспектированного лекционного материала, а также дополнение его сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект с обязательным фиксированием библиографических данных источника. Изучение материала каждого раздела заканчивается контролем его освоения в форме контрольной работы. Результаты выполнения контрольных работ оцениваются в соответствии с принятой в университете рейтинговой системой оценки знаний.

Рабочая программа дисциплины «Хемоинформатика» предусматривает проведение лабораторного практикума в объеме 15 ч. Работы выполняются в часы, выделенные учебным планом во 2 семестре. Лабораторный практикум выполняется, когда изучен материал большинства разделов, входящих в раздел «Методы построения моделей связи структуры и активности». Лабораторные работы охватывают 2-5 разделы (в среднем по 1 работе на каждый раздел). На выполнение каждой работы отводится примерно 4 часа в зависимости от трудоемкости.

Целью выполнения лабораторных работ является закрепление полученных знаний по дисциплине, расширение эрудиции и кругозора студента магистратуры в области медицинской химии, поиска биологически активных веществ и анализа связи их структуры с активностью, развитие творческого потенциала и самостоятельного мышления студента.. В задачи подготовки к выполнению лабораторных работ входит приобретение навыков работы с информационными ресурсами, получение опыта проведения работ, обработки, анализа полученных результатов я, формулирования выводов по выполненной работе,

знакомство с правилами оформления лабораторных работ.

При подготовке к выполнению лабораторных работ студент должен руководствоваться следующими основными принципами:

- сочетание в работе, с одной стороны, изученных в дисциплине «Хемоинформатика» теоретических положений и сведений, с другой, – результатов новейших разработок в области компьютерного моделирования связи структуры и активности биологически активных веществ;

- творческий аналитический подход к полученным в лабораторной работе результатам, исключающий их простое перечисление и изложение.

Работа над подготовкой в лабораторной работе ориентирована в первую очередь на самостоятельную работу обучающегося с информационными ресурсами – рекомендуемой литературой, конспектом лекций и раздаточным материалом, научно-технической и справочной литературой, ГОСТами, ресурсами Интернета, базами данных. Доступ к указанным ресурсам обеспечивается фондами научно-технической библиотеки вуза и городских научно-технических библиотек, электронными библиотеками и поисковыми системами Интернета, материалами тематических выставок и научно-технических конференций.

При оформлении лабораторных работ следует ориентироваться на требования, приведенные в ГОСТах.

Содержание и оформление лабораторных работ оценивается в соответствии с принятой в университете рейтинговой системой оценки знаний. Максимальная оценка за выполнение всех работ лабораторного практикума составляет 10 баллов и входит в 60 баллов, отводимых на работу студента в семестре.

Совокупная оценка текущей работы студента магистратуры в семестре складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), расчетно-графической работы (максимальная оценка 10 баллов) и лабораторного практикума (максимальная оценка 10 баллов). Максимальная оценка текущей работы в каждом семестре составляет 60 баллов.

В соответствии с учебным планом изучение материала разделов 1-5 происходит во 2 семестре и заканчивается контролем его освоения в форме 3 контрольных работ (максимальная оценка 12, 16 и 12 баллов за каждую контрольную работу) и зачета с оценкой (максимальная оценка – 40 баллов).

2.2. Для студентов, обучающихся с использованием дистанционных образовательных технологий

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. Объем дисциплины и распределение нагрузки по видам работ соответствует п. 4.1 рабочей программы дисциплины. Распределение баллов соответствует рабочей программе дисциплины либо может быть изменено в соответствии с решением кафедры, в случае перехода на ЭО и ДОТ в процессе обучения. Решение кафедры об используемых технологиях и системе оценивания достижений обучающихся принимается с учетом мнения ведущего преподавателя и доводится до обучающихся.

3. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

3.1. Для преподавателей, реализующих образовательные программы без использования дистанционных образовательных технологий

Дисциплина «Хемоинформатика» изучается в 1 семестре.

При подготовке и проведении занятий преподаватель должен ориентироваться на то, что студенты, обучающиеся в магистратуре имеют общую подготовку по общенаучным, инженерным дисциплинам и основным профессиональным дисциплинам профиля, в объеме, предусмотренном учебным планом магистратуры, а также опыт восприятия и конспектирования изучаемого материала. В связи с этим материал дисциплины должен опираться на полученные знания и быть ориентирован на их расширение и углубление в соответствии с современными теоретическими представлениями и технологическими новациями. Обучение студентов может быть организовано как в виде традиционных лекций и практических занятий, так и научной дискуссии, которая помогает приобрести навыки и умения обосновывать круг рассматриваемых вопросов, формулировать главные положения, определения и практические выводы из теоретических положений. На занятиях должна прослеживаться взаимосвязь рассматриваемых вопросов с ранее изученным материалом.

Основной задачей преподавателя, ведущего занятия по дисциплине «Хемоинформатика», является формирование у студентов компетенций в области медицинской химии, поиска биологически активных веществ и анализа связи их структуры с активностью. Преподаватель должен акцентировать внимание студентов на общих вопросах органической и физической химии. При выборе материала для занятий желательно обращаться к опыту ведущих зарубежных и отечественных научно-исследовательских центров, научно-производственных фирм и предприятий, использовать их научные, информационные и рекламные материалы и проводить их сравнительный анализ.

В вводной лекции дисциплины следует уделить внимание месту компьютерных методов оценки связи структура-биологическая активность в системе химических знаний и ее взаимосвязи с фундаментальными основами органической и физической органической химии, выделить основные пути развития и современное состояние дизайна лекарственных препаратов.

Рекомендуется напомнить студентам об основных подходах к анализу статистических закономерностей и механизмах действия биологически активных веществ, которые были в основном рассмотрены в предшествующих курсах, уделить особое внимание основным теоретическим концепциям физической органической химии.

В разделе 1 «Основные концепции хемоинформатики» необходимо рассмотреть принцип использования молекулярных дескрипторов для построения статистических моделей такой связи, а также характеристики биоактивности и особенности классического QSAR. В разделе 2 «Методы построения моделей связи структуры и активности» следует дать представление об общих подходах машинного обучения, выборе оптимальной сложности моделей и ключевых применяемых в QSAR методах моделирования. В разделе 3 «Представление и описание структуры соединений» необходимо представить особенности основных типов молекулярных дескрипторов, методы их расчета и области применения. В разделе 4 «Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул» следует рассказать об основных методах моделирования пространственной структуры и взаимодействий биомолекул и малых лекарственных молекул. В разделе 5 «Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ» основное внимание необходимо уделить комплексному применению различных методов, а также особенностям направленной генерации структур и виртуального скрининга. На практических занятиях следует уделить внимание работе с химическими базами данных,

построению моделей структура–активность, анализу и прогнозированию структуры биомолекул и их комплексов с лигандами. При рассмотрении материалов курса следует обращаться к знаниям студентов, полученных ими в бакалавриате и магистратуре при изучении предшествующих дисциплин.

Для закрепления усвоения материала при проведении практических занятий рекомендуется дать каждому студенту возможность для самостоятельного анализа количественной связи «структура – активность» и моделирования взаимодействия активного вещества с биологической мишенью. При рассмотрении вопросов анализа количественной связи «структура–активность» и моделирования взаимодействия активного вещества с биологической мишенью необходимо уделить особое внимание использованию пакетов современных специализированных программ (Idorsia DataWarrior, OCHEM, Avogadro, UCSF Chimera, AutoDock Vina и др.) и Интернет-ресурсов, а также подробно рассказать об использовании специализированных реферативных источников и баз данных.

Необходимой компонентой лекционных и практических занятий по дисциплине является широкое использование наглядных пособий и иллюстративного материала, в том числе с применением компьютерной техники. Наглядные пособия представляют собой различные компьютерные программы и видеоматериалы по анализу связи структура–активность и молекулярному моделированию, а также каталоги фирм и предприятий с описанием основного вида и характеристик изделий из них. Иллюстративный материал включает презентации по разделам дисциплины, выполненные с использованием различных программных продуктов (например, Power Point в составе Microsoft Office). Для демонстрации иллюстративного материала рекомендуется использование мультимедиа.

При проведении занятий преподаватель может рекомендовать студентам проработку дополнительной литературы по тематике занятия, организовав ее обсуждение на практических занятиях, формирует у студентов навык к самостоятельной работе с разнообразными литературными источниками.

При проведении лабораторного практикума преподавателю основное внимание следует уделять формированию у студентов умения активно использовать полученные знания по дисциплине «Хемоинформатика» при подготовке, проведении и защите лабораторных работ. Следует обращать внимание на необходимость точного выполнения требований к подготовке образцов, проведению экспериментов и обработке результатов для получения достоверных величин определяемых свойств. Следует обращать внимание на необходимость точного выполнения требований к подготовке образцов, проведению экспериментов и обработке результатов для получения достоверных величин определяемых свойств. Студенты должны понимать, что закономерности, найденные в ходе моделирования, отражают механизм действия соединений и могут использоваться для дизайна более активных структур. При защите лабораторных работ спрашивать теоретические основы определения различных характеристик, а также примерный диапазон их значений в различных ситуациях.

3.2. Для преподавателей, реализующих образовательные программы с использованием дистанционных образовательных технологий

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. Объем дисциплины и распределение нагрузки по видам работ соответствует рабочей программе дисциплины и п. 2.1 либо может быть изменено в соответствии с решением кафедры, в случае перехода на ЭО и ДОТ в процессе обучения. Решение кафедры об используемых технологиях и системе оценивания достижений обучающихся принимается с учетом мнения ведущего преподавателя и доводится до обучающихся.

Реализация ЭО и ДОТ предполагает использование следующих видов и учебной деятельности: онлайн консультации, практические занятия, видео-лекции; лабораторные

работы, проводимые полностью или частично с применением ЭО и ДОТ; текущий контроль в режиме тестирования и проверки домашних заданий; онлайн консультации по курсовому проектированию; самостоятельная работа и т.д.

При реализации дисциплины в зависимости от конкретной ситуации ЭО и ДОТ могут быть применены в следующем виде:

- объем часов контактной работы обучающихся с преподавателем не сокращается) и электронные образовательные ресурсы (ЭОР) методически обеспечивают самостоятельную работу обучающихся в объеме, предусмотренном рабочей программой данной дисциплины. При этом в случае необходимости занятия проводятся в режиме онлайн.

**Дополнения и изменения к методическим указаниям
по дисциплине «Хемоинформатика»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химическая технология биологически активных
веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения / дополнения	Содержание дополнения / изменения	Основание внесения изменения/дополнения
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.



РХТУ им. Д.И. Менделеева
ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ПРОСТОЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Владелец: Макаров Николай Александрович
И.о. директора, Филиал РХТУ
им. Д.И. Менделеева в г.
Ташкенте (Республика
Узбекистан)

Подписан: 04:02:2026 12:02:35