

**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

«29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Хемоинформатика»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа – «Химическая технология биологически
активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Ташкент 2024

Программа составлена: к.х.н., доцентом кафедры химии и технологии органического синтеза Е.В. Радченко; к.х.н., доцентом, заведующим кафедрой химии и технологии органического синтеза С.В. Попковым;

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Хемоинформатика»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области изучения дисциплин: «Органическая химия», «Основы биохимии», «Химическая технология биологически активных веществ», «Квантовая химия».

Цель дисциплины – формирование у обучающихся систематизированных знаний о современных методах хемоинформатики, повышение профессиональных компетенций в области компьютерного анализа и моделирования химической информации, получение навыков в интерпретации результатов химических исследований, проведенных с применением компьютерного анализа и моделирования.

Задачи дисциплины –

- - изучить принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;
- - освоить систематизированные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью;
- сформировать практические навыки компьютерной обработки и анализа химической информации.

Дисциплина **«Хемоинформатика»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	

		<p>области химии и технологии биологически активных веществ.</p>	<p>ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности</p>	
--	--	--	---	--

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем;
- цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;
- методы описания и моделирования структуры веществ;
- возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов.

Уметь:

- выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме;
- оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью.

Владеть:

- теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов;
- практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки	1,17	42	31,5
Лекции	0,25	9	6,75
Практические занятия	0,75	27	20,25
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,75</i>	<i>27</i>	<i>20,25</i>
Лабораторные работы	0,42	15	11,25
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,42</i>	<i>15</i>	<i>11,25</i>
Самостоятельная работа	1,58	57	42,75
Контактная самостоятельная работа	1,58	0,3	0,23
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		56,4	42,52
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. рабо- ты	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. рабо- та
1.	Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики	14	2,5	1,5	-	2,5	2,5	-	-	10
2.	1.1 Хемоинформатика как междисциплинарная область современной науки	2.5	-	0.5	-	-	-	-	-	2
3.	1.2 Базовые принципы и концепции анализа связи структуры и биологической активности	5.5	1	0.5	-	1	1	-	-	4
4.	1.3 Классический QSAR	6	1,5	0.5	-	1,5	1,5	-	-	4
5	Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности Статистическое обучение	23	9,5	1,5	-	6,5	6,5	3	3	12
6	Раздел 3. Представление и описание структуры соединений	26	12	2	-	9	9	3	3	12
7	Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул	26	12	2	-	7	7	5	5	12
8	Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ Конструирование и поиск активных структур	19	6	2	-	2	2	4	4	11
9	ИТОГО	108	42	9	-	27	27	15	15	57

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики.

1.1. Хемоинформатика как междисциплинарная область современной науки. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики. Цикл разработки лекарственных средств, доклинические и клинические исследования. Выбор и валидация мишени, поиск и оптимизация соединений-лидеров. Компьютерное моделирование и дизайн физиологически активных соединений как одно из важнейших направлений хемоинформатики, химии биологически активных веществ и медицинской химии.

1.2. Базовые принципы и концепции анализа связи структуры и биологической активности. Биологические мишени и лиганды. Фармакодинамика и фармакокинетика. Биодоступность и токсичность. Принцип связи структуры и свойства/активности. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR). Статистическое обучение. Модель, ее использование для прогнозирования и интерпретации. Построение модели и прогноз, обучающие, контрольные и прогнозные выборки. Математическое представление (описание) структур с помощью дескрипторов молекулярной структуры. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность». Различные уровни оценки биоактивности. Качественные и количественные характеристики. Концентрационные, термодинамические, кинетические, интегральные параметры. Зависимость эффекта от концентрации или дозы, логарифмическое представление активности.

1.3. Классический QSAR. Метод Хэнча. Использование простых физико-химических дескрипторов и статистических моделей. Липофильность и ее влияние на активность. Константы заместителей. Константы Гаммета и Тафта, липофильная константа Хэнча. Учет влияния нескольких заместителей. Метод Фри-Уилсона. Индикаторные переменные и вклады заместителей. Взаимосвязь подходов Хэнча и Фри-Уилсона, их преимущества и недостатки.

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

2.1. Статистическое обучение. Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения. Функциональные модели, зависимые и независимые переменные. Качество моделей: точность описания обучающей выборки и предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей. Метод перекрестного контроля. Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений. Зависимость точности описания и предсказательной способности от сложности моделей, выбор оптимальной модели. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов. Отбор дескрипторов. Проекция на скрытые переменные: анализ главных компонент, регрессия частичных наименьших квадратов. Методы классификации и распознавания образов. Виды классификационных задач. Кластерный анализ. Многоклассовая классификация: линейный дискриминантный анализ, деревья решений, метод мягкого независимого моделирования аналогии в классах (SIMCA). Понятие об одноклассовой классификации. Характеристики качества классификации. Моделирование нелинейных зависимостей. Искусственные нейронные сети как гибкий общий метод моделирования нелинейных зависимостей на основе упрощенных представлений об обработке информации в мозге человека и животных. Понятие о методе опорных векторов.

Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.

3.1. Представление и описание структуры соединений. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк. Типы дескрипторов молекулярной структуры. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.

Подструктурные (фрагментные) дескрипторы и их применение для моделирования связи структуры органических соединений с их физико-химическими и фармакокинетическими свойствами, токсичностью, биоактивностью, оценки структурного подобия, прогнозирования спектров биоактивности веществ. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомшеней.

4.1. Структура и взаимодействия лигандов и биомшеней. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени. Молекулярное моделирование. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты. Конформационное пространство, оптимальная и биологически активная конформация. Молекулярная динамика – моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные центры, учет формы молекул. Структура и функционирование белковых биомшеней биологически активных веществ.

Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии. Моделирование взаимодействия лиганда и биомшени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Жесткий, гибкий и полужесткий докинг. Оценочные функции. Более точный анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ.

5.1. Конструирование и поиск активных структур. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга. Источники библиотек структур: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур. Предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсифорных и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур. Многоуровневая специфическая фильтрация с использованием информации о структуре известных лигандов (прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям) и структуре биомшени (молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени). Фокусированные библиотеки перспективных структур. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:					
1	основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем;	+	+	+	+	+
2	цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;	+	+	+	+	+
3	методы описания и моделирования структуры веществ;	+	+	+	+	+
4	возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов;	+	+	+	+	+
	Уметь:					
5	выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме;	+	+	+	+	+
6	оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи «структура – биологическая активность» и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью;	+	+	+	+	+
	Владеть:					
7	теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов;	+	+	+	+	+

8	практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации;	+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие компетенции и индикаторы их достижения:						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
9	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	+	+	+	+
10	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+	+
11		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Базовые принципы анализа связи структуры и биологической активности. Метод Хэнча. Константы заместителей.	2,5
2	2	Статистическое обучение	6,5
3	3	Дескрипторы молекулярной структуры	9
4	4	Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул	7
5	5	Направленное конструирование и поиск структур лекарств	2
Итого:			27

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «Хемоинформатика», а также дает знания о новейших разработках в области дизайна биологически активных веществ, выявления закономерностей связи структуры и биологической активности. Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 10 баллов (максимально по 2 балла за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	Раздел 2, Раздел 3	Подготовка и обработка информации по структуре и биологической активности органических соединений.
2		Моделирование связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ.
3	Раздел 4, Раздел 5	Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом фармакофорного поиска.
4		Моделирование пространственной молекулярной структуры органических соединений, анализ структуры биомолекул и ее взаимодействия с активными лигандами
5		Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом молекулярного докинга.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;

подготовку к контрольным работам по материалу дисциплины;

подготовку к лабораторным работам;

- работу с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- посещение отраслевых выставок, семинаров и конференций;
- подготовку к сдаче **зачета с оценкой** (1 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), расчетно-графической работы (максимальная оценка 10 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 10 баллов) и итогового контроля в форме **зачета с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов). Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы: контрольная работа № 1 (по разделам 1 и 2), контрольная работа № 2 (по разделу 3), контрольная работа № 3 (по разделам 4 и 5). Максимальная оценка за контрольные работы №1, №3 составляет 12 баллов, за контрольную работу №2 16 баллов. По материалам разделов 1,2,3,5 выполняется расчетно-графическая работа с максимальной оценкой в 10 баллов. Лабораторные работы в количестве 5 оцениваются в 10 баллов, по 2 балла каждая. Общее максимальное число баллов в семестре составляет 60 баллов.

8.1. Примерная тематика расчетно-графической работы.

Максимальная оценка – 10 баллов

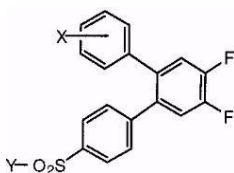
Вариант №1

В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

1) С помощью какого-либо программного пакета статистического анализа (например, Microsoft Excel, Statistica, Origin, Maple, MathCAD, Mathlab, Statgraphics и т.д.) постройте для этих соединений линейные регрессионные модели связи структура-активность с использованием различных сочетаний из 1, 2 и 3 дескрипторов. Приведите таблицу статистических параметров моделей (коэффициенты, R , $RMSE$, F).

2) Учитывая значения параметров, выберите оптимальную модель, которая обеспечивает достаточно высокую точность при минимальном числе параметров. Запишите соответствующее регрессионное уравнение. Постройте для модели график соответствия экспериментальных и рассчитанных по модели значений активности.

3) Каков физико-химический смысл дескрипторов, входящих в оптимальную модель? Какое влияние на активность оказывают те или иные особенности структуры? Попытайтесь предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2

N	X	Y	log 1/C	ClogP	σ^+_X	CMR
1	4-F	Me	7.85	4.67	-0.07	9.09
2	3-Cl-4-F	Me	8.00	5.38	0.30	9.59
3	3-Me-4-F	Me	8.30	5.17	-0.14	9.56
4	3-F-4-OMe	Me	7.68	4.52	-0.44	9.71
5	3-Cl-4-OMe	Me	7.72	5.06	-0.41	10.19
6	3-Me-4-OMe	Me	7.89	4.96	-0.85	10.16
7	3,4-(OMe) ₂	Me	6.47	4.17	-0.66	10.31
8	3-OCH ₂ O-4	Me	7.92	3.73	-0.68	9.67
9	4-Me	Me	8.16	5.03	-0.31	9.54
10	3-Cl-4-Me	Me	7.89	5.74	0.06	10.03
11	3,4-Me ₂	Me	7.64	5.47	-0.38	10.01
12	3-Me-4-Cl	Me	8.22	5.74	0.04	10.03

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса

CMR – расчетное значение молекулярной рефракции

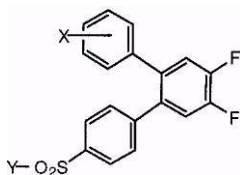
Вариант №2

В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

1) С помощью какого-либо программного пакета статистического анализа (например, Microsoft Excel, Statistica, Origin, Maple, MathCAD, Mathlab, Statgraphics и т.д.) постройте для этих соединений линейные регрессионные модели связи структура-активность с использованием различных сочетаний из 1, 2 и 3 дескрипторов. Приведите таблицу статистических параметров моделей (коэффициенты, *R*, *RMSE*, *F*).

2) Учитывая значения параметров, выберите оптимальную модель, которая обеспечивает достаточно высокую точность при минимальном числе параметров. Запишите соответствующее регрессионное уравнение. Постройте для модели график соответствия экспериментальных и рассчитанных по модели значений активности.

3) Каков физико-химический смысл дескрипторов, входящих в оптимальную модель? Какое влияние на активность оказывают те или иные особенности структуры? Попытайтесь предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.

**IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2**

N	X	Y	log 1/C	ClogP	σ^+_X	CMR
1	4-F	NH ₂	8.40	4.50	-0.07	9.00
2	3-Cl-4-F	NH ₂	8.70	5.22	0.30	9.49
3	3-Me-4-F	NH ₂	8.70	5.00	-0.14	9.46
4	3-F-4-OMe	NH ₂	7.89	4.37	-0.44	9.62
5	3-Cl-4-OMe	NH ₂	7.89	4.91	-0.41	10.09
6	3,5-Cl ₂ -4-OMe	NH ₂	7.68	5.43	-0.04	10.58
7	3-Me-4-OMe	NH ₂	8.30	4.79	-0.85	10.06
8	3,4-(OMe) ₂	NH ₂	7.19	4.02	-0.66	10.22

9	3-OCH ₂ O-4	NH ₂ ^o	8.40	3.58	-0.68	9.58
10	4-Me	NH ₂	8.40	4.86	-0.31	9.45
11	3-C1-4-Me	NH ₂	8.52	5.57	0.06	9.94
12	3,4-Me ₂	NH ₂	8.30	5.31	-0.38	9.91

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса

CMR – расчетное значение молекулярной рефракции

Оценочный материал к расчетно-графической работе

Вопрос	1	2	3	Σ
Баллы	2	3	5	10

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики.

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики.
2. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
3. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
4. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
5. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
6. Классический QSAR. Метод Фри-Уилсона.

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

1. Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Качество моделей: предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей. Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений.
4. Зависимость точности описания и предсказательной способности от сложности моделей, выбор оптимальной модели.
5. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов.
6. Отбор дескрипторов в множественной линейной регрессии.
7. Проекция на скрытые переменные: анализ главных компонент.
8. Регрессия частичных наименьших квадратов.
9. Методы классификации и распознавания образов.
10. Моделирование нелинейных зависимостей. Искусственные нейронные сети как гибкий общий метод моделирования нелинейных зависимостей на основе упрощенных представлений об обработке информации в мозге человека и животных.

Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Типы дескрипторов молекулярной структуры.
3. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла.
4. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул.
5. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
6. Подструктурные (фрагментные) дескрипторы и их применение для моделирования

связи структуры органических соединений с их физико-химическими и

фармакокинетическими свойствами, токсичностью, биоактивностью, оценки структурного подобия, прогнозирования спектров биоактивности веществ.

7. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомишеней.

1. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени.

2. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.

3. Конформационное пространство, оптимальная и биологически активная конформация.

4. Молекулярная динамика – моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени.

5. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA.

6. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные центры, учет формы молекул.

7. Структура и функционирование белковых биомишеней биологически активных веществ. Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии.

8. Моделирование взаимодействия лиганда и биомишени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Жесткий, гибкий и полужесткий докинг. Оценочные функции.

9. Анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ.

1. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR.

2. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга.

3. Источники библиотек структур для виртуального скрининга: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур.

4. Виртуальный скрининг: предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсических и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур.

5. Виртуальный скрининг: многоуровневая специфическая фильтрация с использованием информации о структуре известных лигандов (прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям) и структуре биомишени (молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени).

6. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.

Примеры контрольных работ

Контрольная работа №1

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

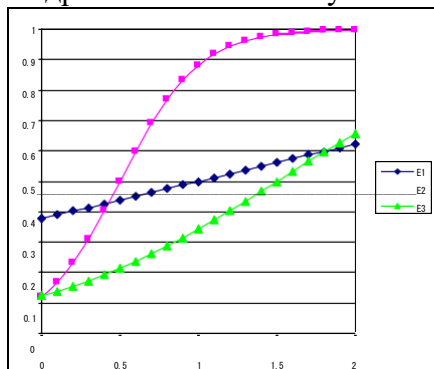
Максимальная оценка – 12 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №1

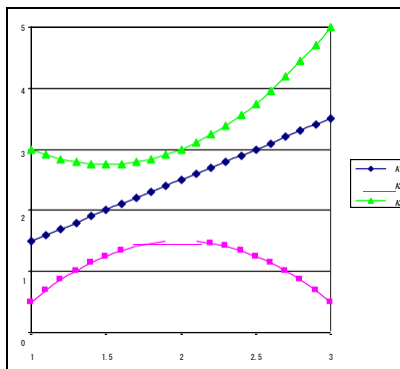
Вопрос	1	2	3	4	5	6	Σ
Баллы	3	3	2	1	2	1	12

Вариант №1

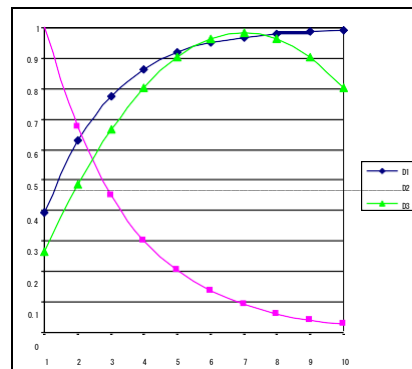
1. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, расставьте соединения по возрастанию активности. Ответ обоснуйте.
4. Какая кривая на рисунке 2 соответствует наиболее общему виду зависимости активности от липофильности? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой среднеквадратическое отклонение имеет значение $RMSE = 0.85$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



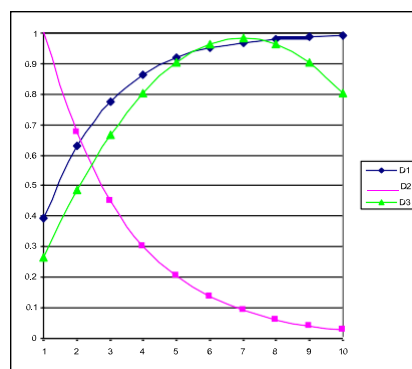
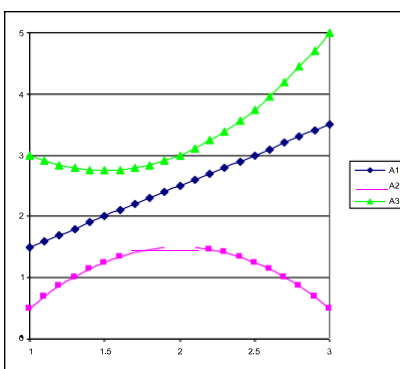
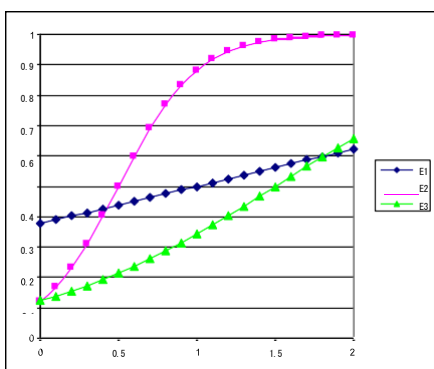
2



3

Вариант №2

1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Регрессия частичных наименьших квадратов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.50$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



Контрольная работа №2**Раздел 3. Представление и описание структуры соединений**

Максимальная оценка – 16 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №2

Вопрос	1	2	3	4	5	6	7	8	9	Σ
Баллы	3	1	1	2	1	1	3	3	1	16

Вариант №1

1. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для 2,2-диметилгексана
3. Рассчитать индекс Винера W для диэтилкетона
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,2-диметилциклопентана
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для γ -аминомасляной кислоты
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для анилина
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера:
NC(=O)Cc1ccc(Br)cc1
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 1,1-дибром-2-этилциклопропан
9. Построить молекулярный суперграф для 1-гидроксинафталина, 1-метиламинонафталина и 1-хлор-7-метилнафталина

Вариант №2

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{rc}$ для 1,1,3-триметилциклопентана
3. Рассчитать индекс Винера W для неопентана
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,1-диметилциклопропана
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для морфолина
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 3,6-диметилоктана

7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: CCOC(=O)C1CCCC(Br)C1
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 1-аза-2,4-диметил-3-фторциклобутан
9. Построить молекулярный суперграф для 2-нитрохинолина, 2-бром-3-хлорхинолина и 8-гидроксихинолина

Контрольная работа №3

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ

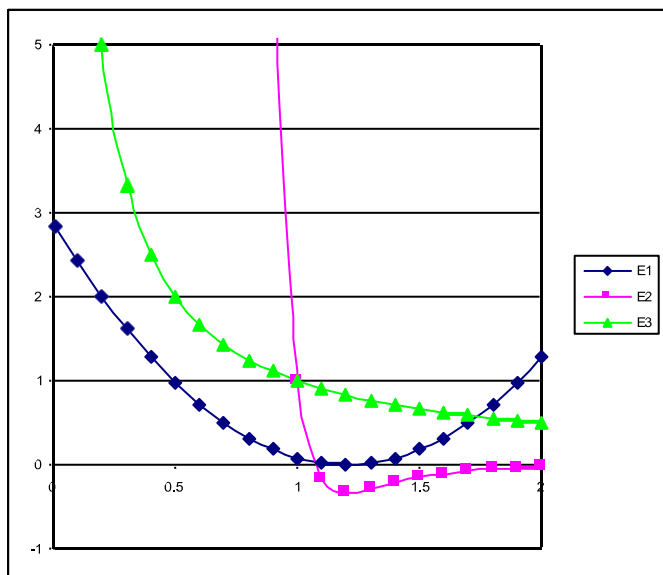
Максимальная оценка – 12 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №3

Вопрос	1	2	3	4	5	Σ
Баллы	3	3	2	2	2	12

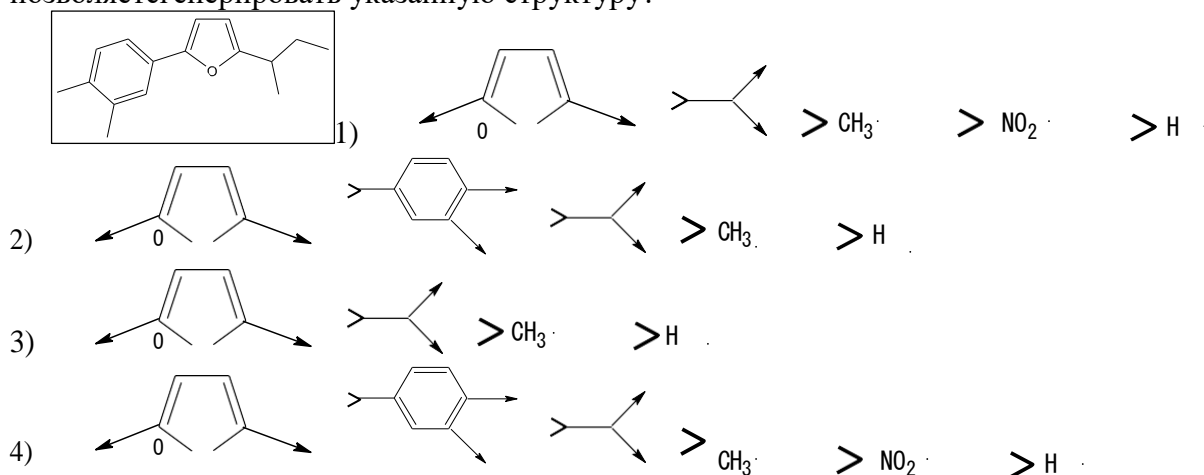
Вариант №1

1. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.
2. Виртуальный скрининг: предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсических и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии деформации связей? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания. VVTLAWHVKGRLVP--TYLS
VVT---HVKVRLVPGATFLS

5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет генерировать указанную структуру?

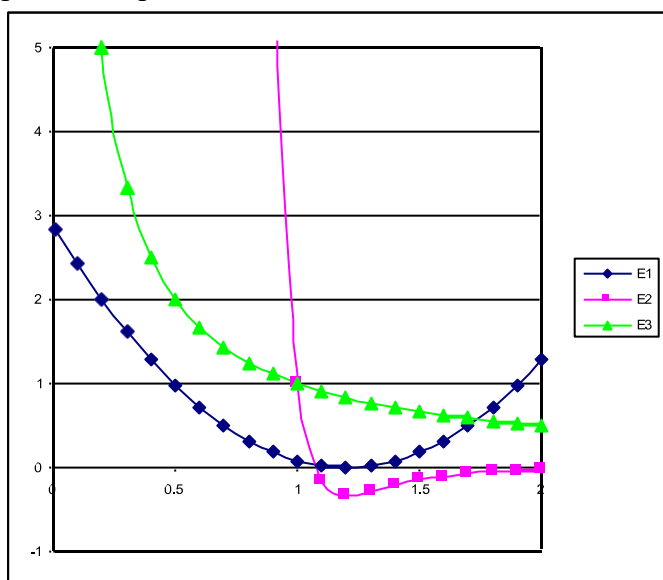


Вариант №2

1. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени.

2. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR.

3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия одноименных зарядов? Ответ обоснуйте.

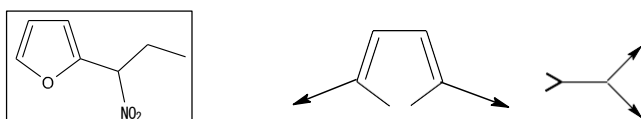


обоснуйте.

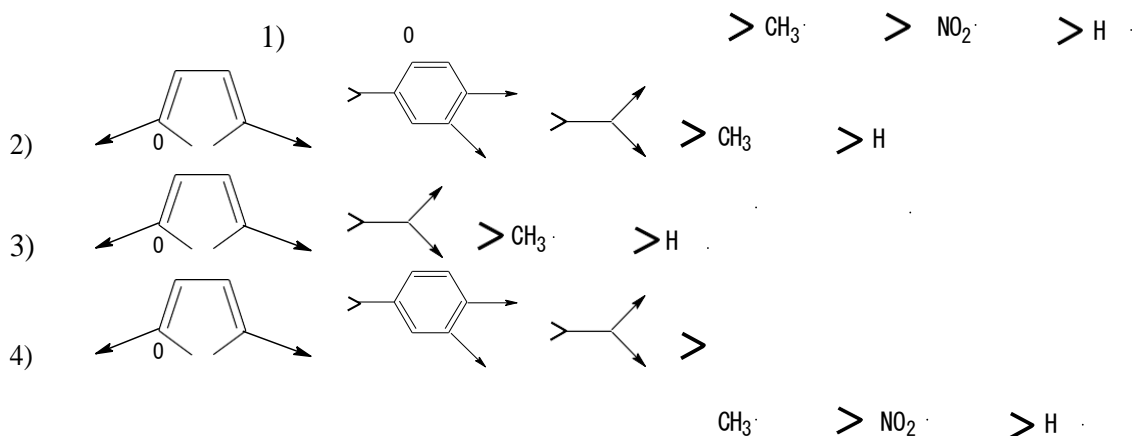
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания. VVT LAW HVK --- VPGAT YLS

VVT - AYHVKGRLVPGASYLS

5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа)



позволяет сгенерировать указанную структуру?



5) Контрольные вопросы к лабораторным работам.

Лабораторная работа № 1 «Подготовка и обработка информации по структуре и биологической активности органических соединений»

- 1) Какие способы представления информации по структуре и биологической активности органических соединений применяются в хемоинформатике?
- 2) Какие основные проблемы могут встречаться в базах данных по структуре и биологической активности органических соединений, полученных из литературных источников?
- 3) Какие варианты поиска можно проводить в базе данных по структуре и биологической активности органических соединений?
- 4) Как осуществляется модификация и дополнение информации в базе данных по структуре и биологической активности органических соединений?
- 5) Что представляют собой рассчитываемые поля и для чего их можно использовать?

Лабораторная работа № 2 «Моделирование связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ»

- 1) Какие основные типы дескрипторов применяются для моделирования связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ?
- 2) Какие основные статистические модели используются для нахождения связи структуры и биологической активности соединений?
- 3) Какое представление биологической активности целесообразно использовать при построении моделей связи структуры и биологической активности и почему?
- 4) Как осуществляется контроль предсказательной способности моделей связи структуры и биологической активности?
- 5) Возможно ли использование такого подхода для прогнозирования физико-химических свойств соединений?

Лабораторная работа № 3 «Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом фармакофорного поиска»

- 1) Что такое фармакофорная модель? Какие особенности структуры она описывает?
- 2) На основе какой информации строится фармакофорная модель?
- 3) Каким образом выполняется анализ и уточнение фармакофорной модели?
- 4) Как фармакофорная модель применяется для виртуального скрининга?
- 5) Каким образом оценивается качество фармакофорной модели?

Лабораторная работа № 4 «Моделирование пространственной молекулярной структуры»

органических соединений, анализ структуры биомшени и ее взаимодействия с

активными лигандами»

- 1) Как осуществляется оптимизация структуры молекул методом молекулярной механики?
- 2) Какие типы молекулярных поверхностей можно рассматривать при анализе структуры молекул?
- 3) Из каких источников можно получить информацию о структуре биологических мишеней?
- 4) Что представляет собой сайт связывания в структуре биологической мишени?
- 5) Какие специфические взаимодействия могут возникать между лигандом и биомишенью?

Лабораторная работа № 5 «Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом молекулярного докинга»

- 1) Какие данные необходимы для оценки взаимодействия лиганда и биомишени методом молекулярного докинга?
- 2) Как осуществляется подготовка структуры биомишени для докинга?
- 3) Что такое оценочная функция и как она характеризует взаимодействие лиганда и биомишени?
- 4) Как метод молекулярного докинга применяется для анализа взаимодействий лиганда в сайте связывания и виртуального скрининга?
- 5) Каким образом оценивается и оптимизируется точность процедуры виртуального скрининга с помощью молекулярного докинга?

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины

(I семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.
Контрольный билет содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (I семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR). Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой (I семестр).

Зачет с оценкой по дисциплине «Хемоинформатика» проводится в I семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы зачета с оценкой оцениваются из максимальной оценки 40 баллов по 20 баллов за каждый вопрос.

Пример билета для *зачета с оценкой*:

<i>«Утверждаю»</i> <i>А.У. Абдурахимова</i>	Министерство науки и высшего образования РФ
	Филиал РХТУ им. Д.И. Менделеева в г. Ташкенте (Республика Узбекистан)
	Направление 18.04.01 Химическая технология, магистерская программа «Химическая технология биологически активных веществ»
	Дисциплина «Хемоинформатика»
<p align="center">Билет № 1</p> <p>1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей. Метод Фри-Уилсона.</p> <p>2. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.</p>	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Хёльте Х.-Д., Зипль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М.: Бином, 2010.— 318 с.

Б. Дополнительная литература

1. Орлов С.И. Математические методы оценки связи структура – пестицидная активность. Учебное пособие. / М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2001. 64 с.
2. Раевский, О. А. Введение в конструирование биологически активных веществ [Текст] : учебное пособие / О.А. Раевский. - М. : МХТИ, 1984. - 80 с
3. Раевский, О. А. Сборник задач по курсу "Конструирование биологически активных веществ" [Текст] : учебное пособие / О.А. Раевский, В.Ю. Григорьев. - М. : МХТИ, 1986. - 80 с.
4. Кларк, Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы [Текст] : пер. с англ. / Т. Кларк. - М. : Мир, 1990. - 384 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- учебные пособия по дисциплине;
- раздаточный материал к разделам лекционного курса и к практическим занятиям по дисциплине;
- электронные презентации к разделам лекционного курса;
- справочные материалы в печатном и электронном виде;
- кафедральные библиотеки электронных изданий.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134.
- Журнал «Journal of medicinal chemistry» ISSN 0022-2623.
- Журнал «QSAR and combinatorial science» ISSN 1611-020X, 1521-3838 (онлайновая версия).

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://lib.muctr.ru/> - фонды учебной, учебно-методической, научной, периодической научно-технической литературы Информационно-библиотечного центра (ИБЦ) РХТУ им. Д. И. Менделеева.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

– компьютерные презентации интерактивных лекций – по 5 разделам дисциплины (общее число слайдов – 486);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Хемоинформатика»* проводятся в форме лекций, практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Для проведения лабораторных занятий:

Компьютеры с выходом в Интернет;

Специализированные компьютерные программы для обработки структурной информации и молекулярного моделирования (ChemAxon Instant JChem, UCSF Chimera, AutoDock Vina, OpenEye ROCS).

ChemAxon Instant JChem (бесплатная академическая лицензия на сайте <https://chemaxon.com>)

UCSF Chimera (бесплатно распространяется для академического и некоммерческого использования <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera>)

AutoDock Vina (бесплатное открытое программное обеспечение <http://vina.scripps.edu>)

OpenEye ROCS (бесплатная академическая лицензия на сайте <https://www.eyesopen.com>). В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Хемоинформатика» проводятся в форме лекций, практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Электронные презентации к разделам лекционного курса. Справочные материалы в печатном и электронном виде. Кафедральные библиотеки электронных изданий.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

Мультимедийный проектор в комплекте с ноутбуком, Оверхед проектор Medium 524 Р 3-х линзовый.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно

4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: <ul style="list-style-type: none"> • Word • Excel • Power Point • Outlook 	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА- 223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

11. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование модулей	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
<p>Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики</p>	<p><i>Знает:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <p><i>Умеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <input type="checkbox"/> выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью. <p><i>Владеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации. 	<p>Оценка за контрольную работу №1, (2 семестр)</p> <p>Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр)</p> <p>Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)</p>
<p>Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.</p>	<p><i>Знает:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <input type="checkbox"/> основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – <input type="checkbox"/> цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; 	<p>Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр)</p> <p>Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр)</p>

	<p>- методы описания и моделирования структуры веществ;</p>	<p>Оценка за лабораторные работы №1–2 (2 семестр)</p> <p>Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)</p>
	<p>– возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов.</p> <p><i>Умеет:</i></p> <p>–выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме;</p> <p>–оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью</p> <p><i>Владеет:</i></p> <p>– теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов;</p> <p>– практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации.</p>	

<p>Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.</p>	<p><i>Знает:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов.</p> <p><i>Умеет:</i> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью</p>	<p>Оценка за контрольную работу №2 (2 семестр)</p> <p>Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр)</p> <p>Оценка за лабораторные работы №1–2 (2 семестр)</p> <p>Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)</p>
--	--	---

	<p><i>Владеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – <input type="checkbox"/> практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации. <p><input type="checkbox"/></p>	
<p>Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул.</p>	<p><i>Знает:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <p><i>Умеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью <p><i>Владеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа 	<p>Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр)</p> <p>Оценка за лабораторные работы №3–5 (2 семестр)</p> <p>Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)</p>

	химической информации.	
Раздел 5.	<p><i>Знает:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. 	Оценка за контрольную
Конструирование и	<p><i>Умеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью 	работу №3 (2 семестр)
поиск структур лекарств и биологически	<p><i>Владеет:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа 	Оценка за расчетно-графическую работу
активных веществ.		<p>№4 (2 семестр)</p> <p>Оценка за лабораторные работы №3–5 (2 семестр)</p> <p>Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)</p>

12. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Хемоинформатика»
основной образовательной программы

Направление подготовки _____ 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химическая технология биологически активных веществ»

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.



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

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

Подписан: 04:02:2026 11:56:31