

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.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ 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. НАЗНАЧЕНИЕ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств (ФОС) создается в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) для аттестации обучающихся на соответствие их достижений поэтапным требованиям соответствующей основной образовательной программы (ООП) для проведения входного и текущего оценивания, а также промежуточной аттестации обучающихся. ФОС является составной частью нормативно-методического обеспечения системы оценки качества освоения ООП ВО, входят в состав ООП.

ФОС – комплект методических материалов, нормирующих процедуры оценивания результатов обучения, т.е. установления соответствия учебных достижений (результатов обучения) запланированным результатам освоения рабочих программ учебных дисциплин и образовательных программ.

ФОС сформирован на основе ключевых принципов оценивания:

- *валидности*: объекты оценки должны соответствовать поставленным целям обучения;
- *надежности*: использование единообразных стандартов и критериев для оценивания достижений;
- *объективности*: разные обучающиеся должны иметь равные возможности добиться успеха.

ФОС по дисциплине «Информационные технологии в образовании» включает все виды оценочных средств, позволяющих проконтролировать сформированность у обучающихся компетенций и индикаторов их достижения, предусмотренных ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) 18.04.01 Химическая технология, ООП и рабочей программой дисциплины «Информационные технологии в образовании».

ФОС предназначен для профессорско-преподавательского состава и обучающихся РХТУ им. Д.И. Менделеева.

ФОС подлежат ежегодному пересмотру и обновлению.

2. ВХОДНОЙ КОНТРОЛЬ

Входной контроль по дисциплине не предусмотрен.

3. ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ

3.1. Текущий контроль знаний используется для оперативного и регулярного управления учебной деятельностью (в том числе самостоятельной) обучающихся. Текущий контроль успеваемости осуществляется в течение семестра, в ходе повседневной учебной работы в соответствии с Рейтинговой системой оценки знаний обучающихся. Дополнительные к предусмотренным Рейтинговой системой точкам контроля по инициативе преподавателя могут быть предусмотрены точки контроля, расписание которых не противоречат принципам действующей в университете Рейтинговой системы.

Данный вид контроля стимулирует у обучающихся стремление к систематической самостоятельной работе по изучению дисциплины.

3.2. Описание фонда оценочных средств

3.2.1. Шкалы оценивания (методики оценки)

3.2.1.1 Рекомендации по оцениванию письменных и устных ответов обучающихся

С целью контроля и подготовки обучающихся к изучению новой темы в начале каждого лекционного занятия преподавателем проводится устный опрос по выполненным заданиям предыдущей темы.

Критерии оценки:

- *правильность* ответа по содержанию задания (учитывается количество и характер ошибок при ответе);
- *полнота* и *глубина* ответа (учитывается количество усвоенных фактов, понятий и т.п.);
- *осознанность* ответа (учитывается понимание излагаемого материала);
- *логика* изложения материала (учитывается умение строить целостный, последовательный рассказ, грамотно пользоваться специальной терминологией);
- *рациональность* использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи (учитывается умение использовать наиболее прогрессивные и эффективные способы достижения цели);
- *своевременность* и *эффективность* использования наглядных пособий и технических средств при ответе (учитывается способность грамотно и с пользой применять наглядность и демонстрационный опыт при устном ответе);
- использование дополнительного материала;
- рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость устного ответа во времени, с учетом индивидуальных особенностей обучающихся).

Оценка **«отлично»** выставляется, если обучающийся:

- полно и аргументировано отвечает по содержанию задания;
- обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только по учебнику, но и самостоятельно составленные;
- излагает материал последовательно и правильно.

Оценка **«хорошо»** выставляется, если обучающийся дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для оценки «отлично», но допускает 1-2 ошибки, которые сам же исправляет.

Оценка **«удовлетворительно»** выставляется, если обучающийся обнаруживает знание и понимание основных положений данного задания, но:

- излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий или формулировке правил;
- не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры;
- излагает материал непоследовательно и допускает ошибки.

Оценка **«неудовлетворительно»** выставляется, если обучающийся обнаруживает незнание ответа на соответствующее задание, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно и неуверенно излагает материал. Оценка «неудовлетворительно» отмечает такие недостатки в подготовке обучающегося, которые являются серьезным препятствием к успешному овладению последующим материалом.

3.2.2. Задания (вопросы) для текущего контроля по разделам (темам) и видам занятий

С целью контроля и подготовки обучающихся к изучению новой темы в начале каждого лекционного занятия преподавателем проводится устный опрос по выполненным заданиям предыдущей темы.

Критерии оценки:

- *правильность* ответа по содержанию задания (учитывается количество и характер ошибок при ответе);
- *полнота* и *глубина* ответа (учитывается количество усвоенных фактов, понятий и т.п.);
- *осознанность* ответа (учитывается понимание излагаемого материала);
- *логика* изложения материала (учитывается умение строить целостный, последовательный рассказ, грамотно пользоваться специальной терминологией);
- *рациональность* использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи (учитывается умение использовать наиболее прогрессивные и эффективные способы достижения цели);
- *своевременность* и *эффективность* использования наглядных пособий и технических средств при ответе (учитывается способность грамотно и с пользой применять наглядность и демонстрационный опыт при устном ответе);
- использование дополнительного материала;
- рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость устного ответа во времени, с учетом индивидуальных особенностей обучающихся).

Оценка **«отлично»** выставляется, если обучающийся:

- полно и аргументировано отвечает по содержанию задания;
- обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только по учебнику, но и самостоятельно составленные;
- излагает материал последовательно и правильно.

Оценка **«хорошо»** выставляется, если обучающийся дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для оценки «отлично», но допускает 1-2 ошибки, которые сам же исправляет.

Оценка **«удовлетворительно»** выставляется, если обучающийся обнаруживает

знание и понимание основных положений данного задания, но:

- излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий или формулировке правил;
- не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры;
- излагает материал непоследовательно и допускает ошибки.

Оценка **«неудовлетворительно»** выставляется, если обучающийся обнаруживает незнание ответа на соответствующее задание, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно и неуверенно излагает материал. Оценка «неудовлетворительно» отмечает такие недостатки в подготовке обучающегося, которые являются серьезным препятствием к успешному овладению последующим материалом.

3.2.2. Задания (вопросы) для текущего контроля по разделам (темам) и видам занятий

Для текущего контроля предусмотрено три контрольные работы: контрольная работа №1 (максимальная оценка 12 баллов) завершает изучение разделов 1 и 2, контрольная работа №2 (максимальная оценка 16 баллов) завершает изучение раздела 3, контрольная работа №3 (максимальная оценка 12 баллов) завершает изучение разделов 4 и 5, и расчетно-графическая работа (максимальная оценка 10 баллов). Количество вопросов в билете равно шести (контрольная работа №1), девяти (контрольная работа №2), пяти (контрольная работа №3) и трем (расчетно-графическая работа). Максимальная оценка за выполнение контрольных работ составляет 40 баллов. Максимальная оценка за выполнение контрольных работ и расчетно-графической работы составляет 50 баллов. Количество билетов равно удвоенному числу обучающихся в данной группе и составляет 20.

Умение обучающегося предоставить ответы на вопросы демонстрирует освоение им следующих компетенций и индикаторов их достижения:

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

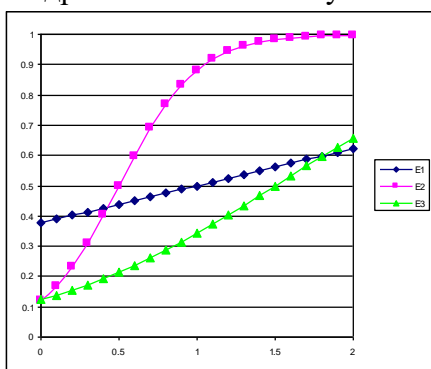
Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК
ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.
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.

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

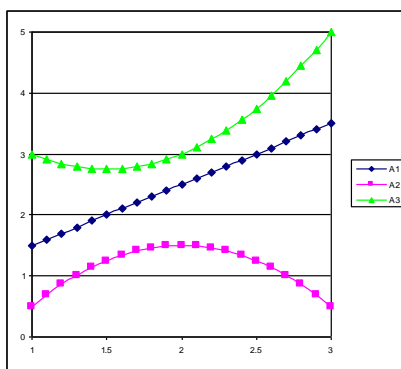
Контрольная работа № 1:

Вариант 1

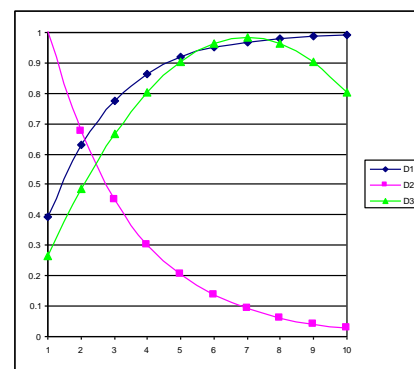
1. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, расставьте соединения 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

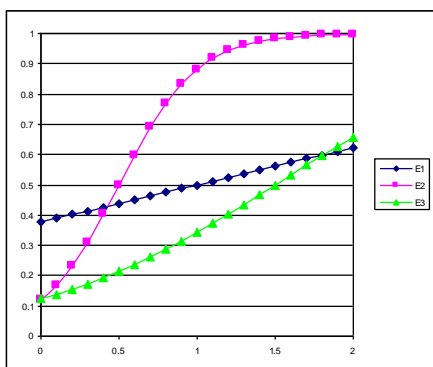


3

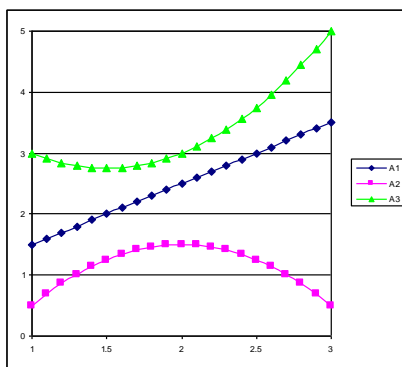
Контрольная работа № 1:

Вариант 2

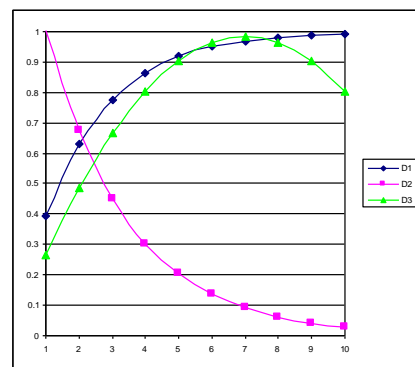
1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Регрессия частичных наименьших квадратов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Каково оптимальное для активности значение 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.



1



2

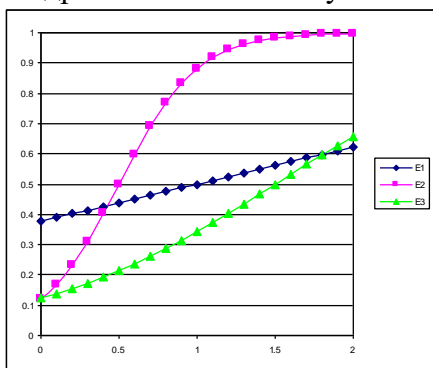


3

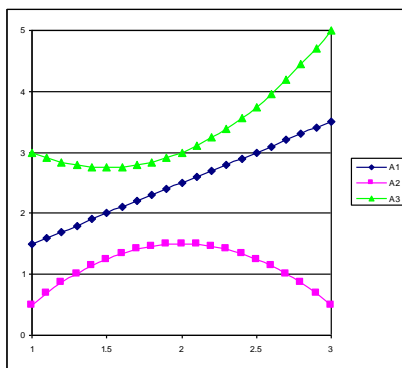
Контрольная работа № 1:

Вариант 3

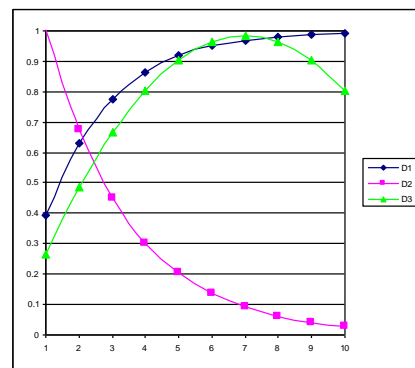
1. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
2. Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация–эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E2. Ответ обоснуйте.
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? 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



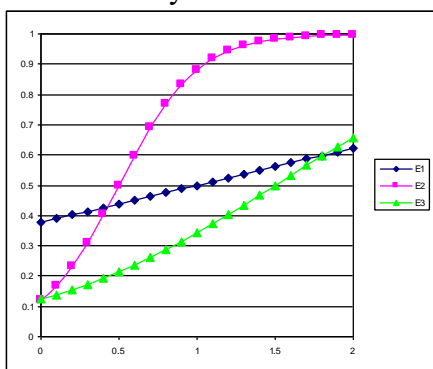
3

Контрольная работа № 1:

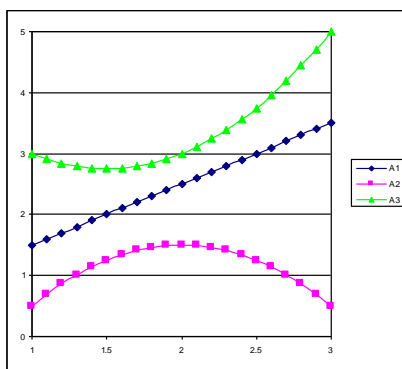
Вариант 4

1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
2. Принципы статистического анализа связи «структура–активность» и машинного обучения.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация–эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. 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 коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.45$? Ответ обоснуйте.

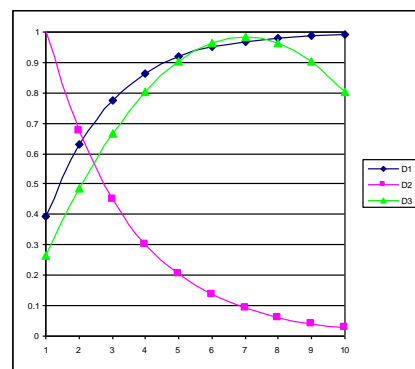
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

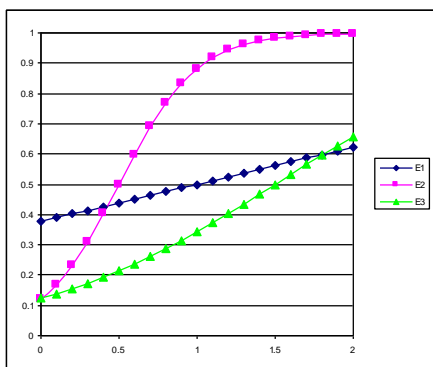


3

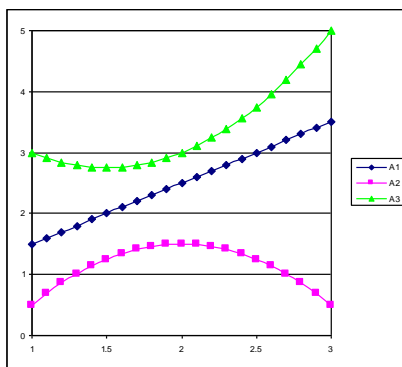
Контрольная работа № 1:

Вариант 5

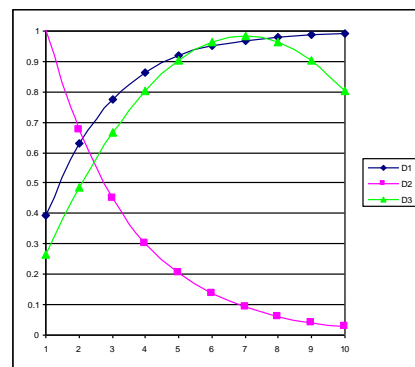
1. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.15$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости коэффициента корреляции от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2



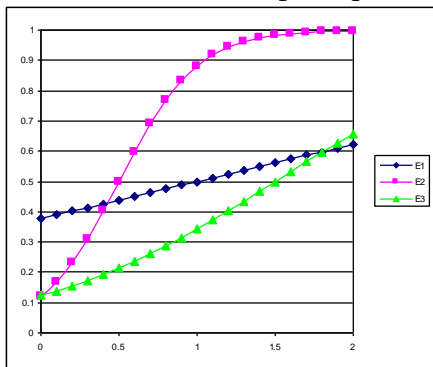
3

Контрольная работа № 1:

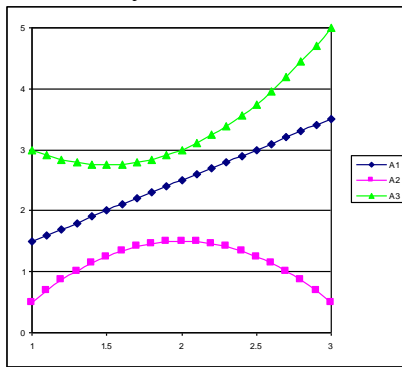
Вариант 6

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики.
2. Качество моделей: предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. Ответ обоснуйте.

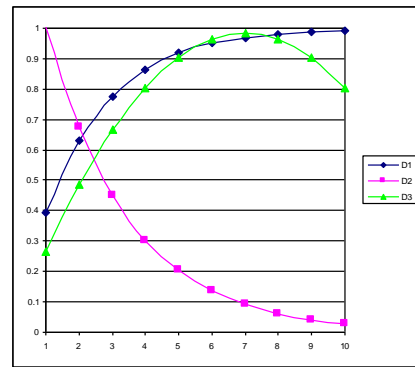
- Какая кривая на рисунке 2 соответствует наиболее общему виду зависимости активности от липофильности? Ответ обоснуйте.
- Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.50$? Ответ обоснуйте.
- Предполагая типичный вид зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов, определите по рисунку 3 оптимальное число факторов. Ответ обоснуйте.



1



2

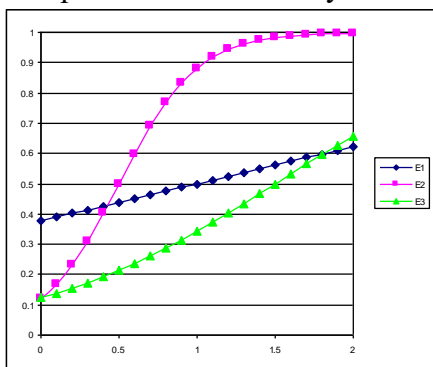


3

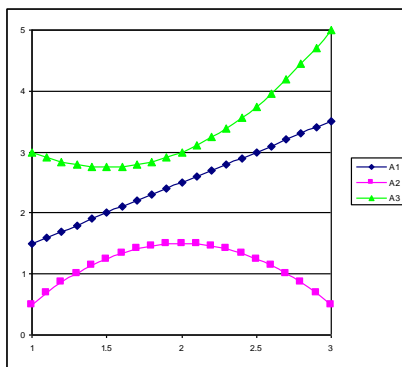
Контрольная работа № 1:

Вариант 7

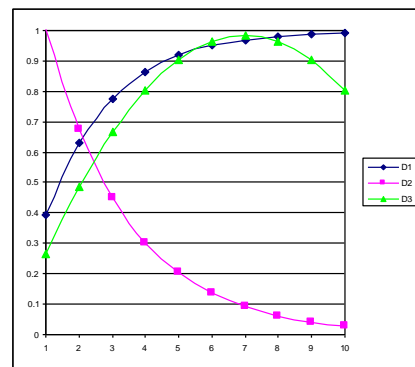
- Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
- Регрессия частичных наименьших квадратов.
- Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация–эффект, расставьте соединения по возрастанию активности. Ответ обоснуйте.
- Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? Ответ обоснуйте.
- Что можно сказать о качестве модели, для которой коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.45$? Ответ обоснуйте.
- Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2



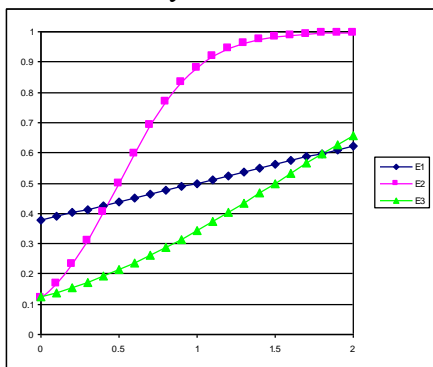
3

Контрольная работа № 1:

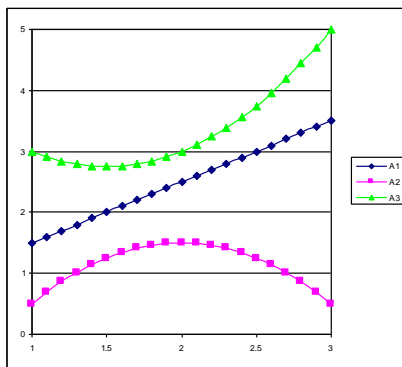
Вариант 8

- Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
- Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений.

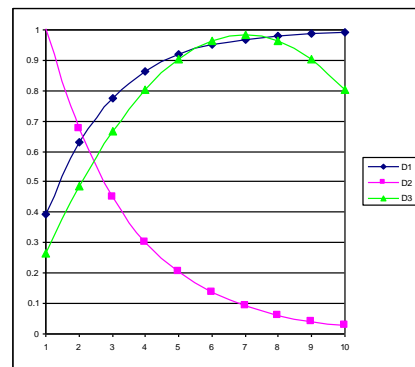
- Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
- Какая кривая на рисунке 2 соответствует наиболее общему виду зависимости активности от липофильности? Ответ обоснуйте.
- Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.15$? Ответ обоснуйте.
- Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

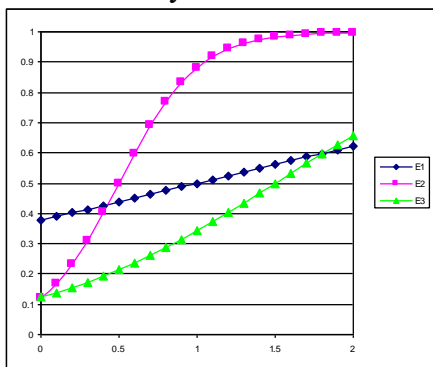


3

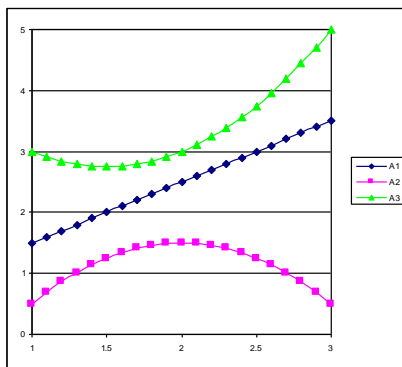
Контрольная работа № 1:

Вариант 9

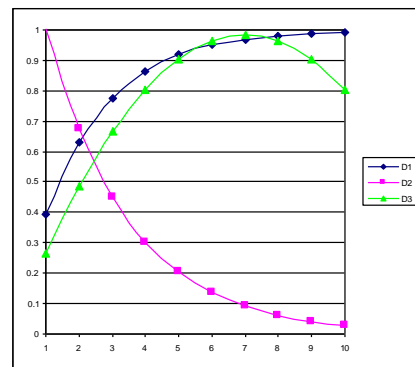
- Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
- Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения.
- Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E2. Ответ обоснуйте.
- Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.
- Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.85$? Ответ обоснуйте.
- Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости коэффициента корреляции от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

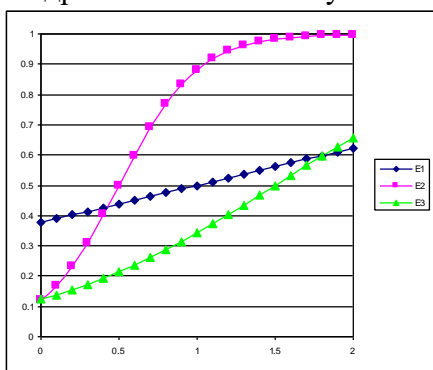


3

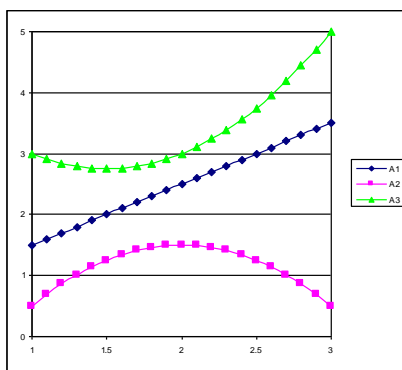
Контрольная работа № 1:

Вариант 10

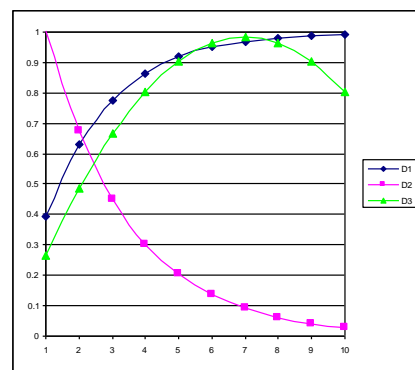
1. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
2. Регрессия частичных наименьших квадратов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация–эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. Ответ обоснуйте.
4. Какая 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 $RMSE = 0.25$? 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

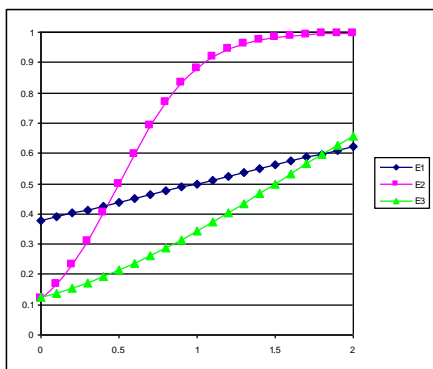


3

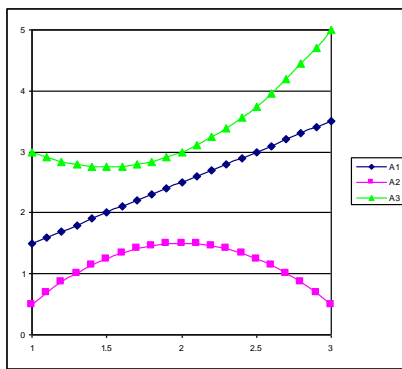
Контрольная работа № 1:

Вариант 11

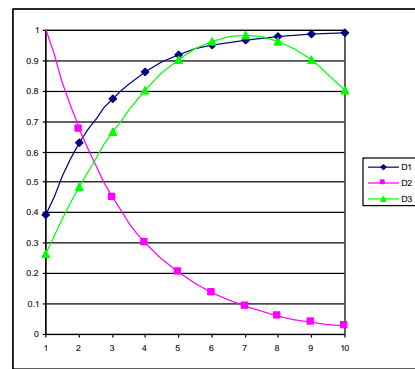
1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики.
2. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация–эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E2. Ответ обоснуйте.
4. Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.45$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

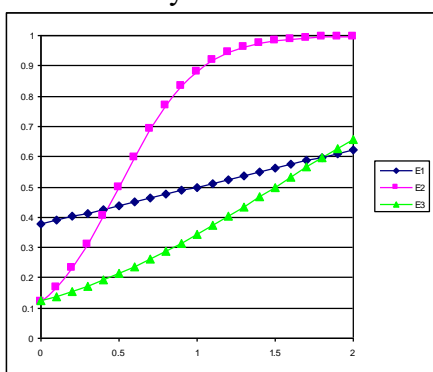


3

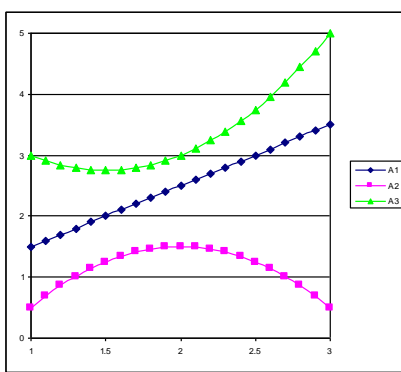
Контрольная работа № 1:

Вариант 12

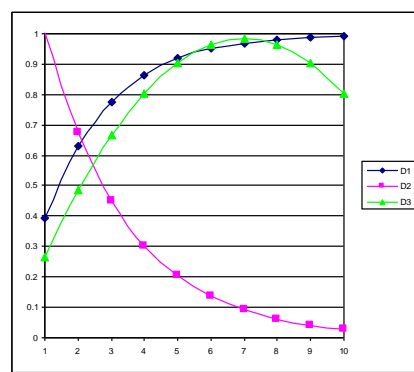
1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, расставьте соединения по возрастанию активности. Ответ обоснуйте.
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.95$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости коэффициента корреляции от числа факторов в модели регрессии частных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

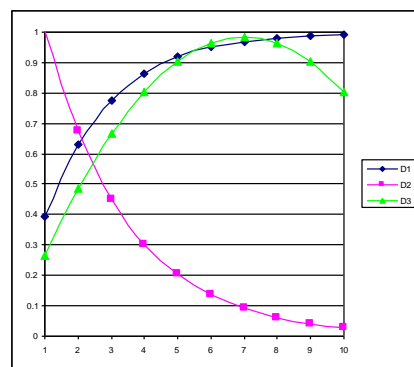
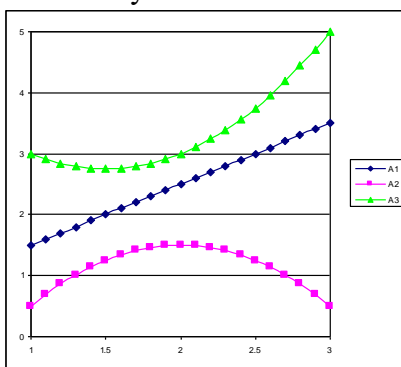
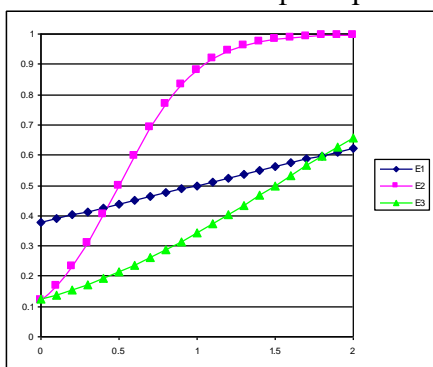


3

Контрольная работа № 1:

Вариант 13

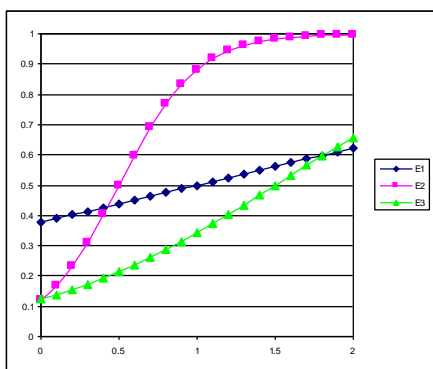
1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Отбор дескрипторов в множественной линейной регрессии.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Какая кривая на рисунке 2 соответствует наиболее общему виду зависимости активности от липофильности? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.15$? Ответ обоснуйте.
6. Предполагая типичный вид зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частных наименьших квадратов, определите по рисунку 3 оптимальное число факторов. Ответ обоснуйте.



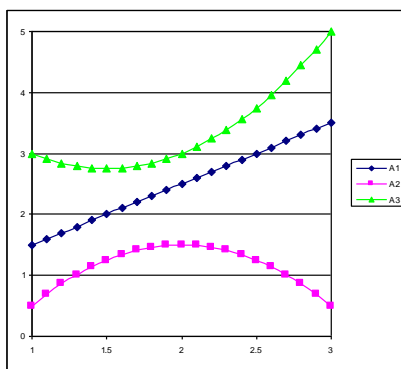
Контрольная работа № 1:

Вариант 14

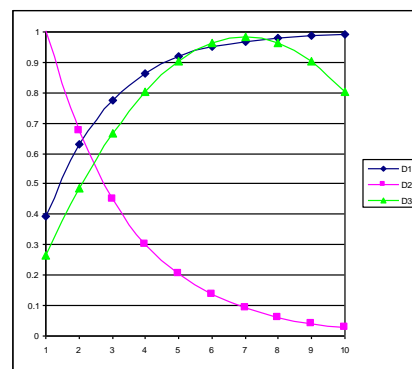
1. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Качество моделей: предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. Ответ обоснуйте.
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? 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 коэффициента корреляции от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2



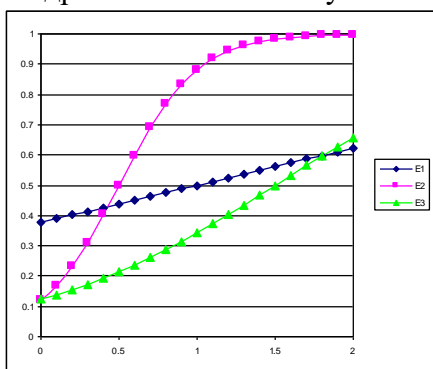
3

Контрольная работа № 1:

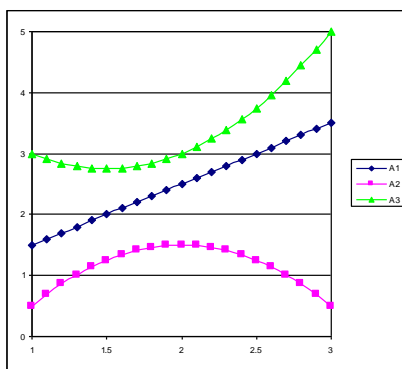
Вариант 15

1. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
2. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов.
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.

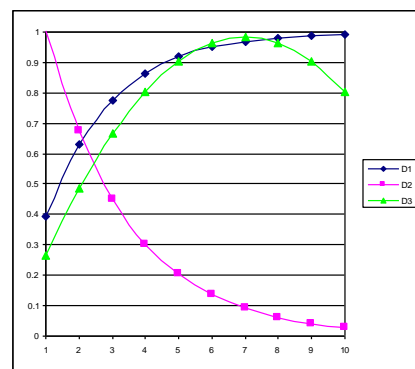
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2

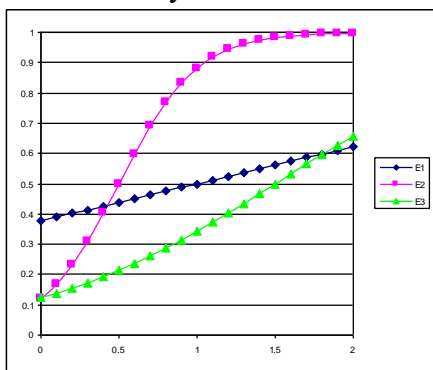


3

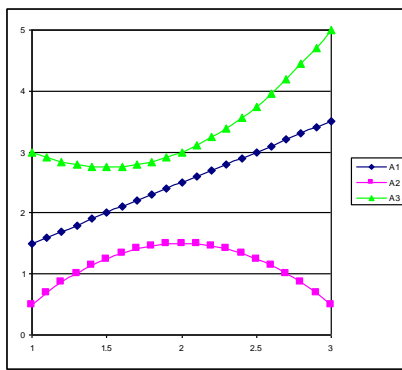
Контрольная работа № 1:

Вариант 16

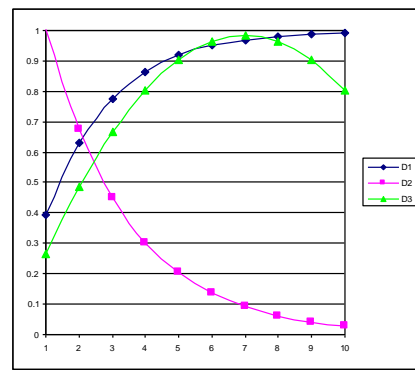
1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Методы классификации и распознавания образов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.95$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2



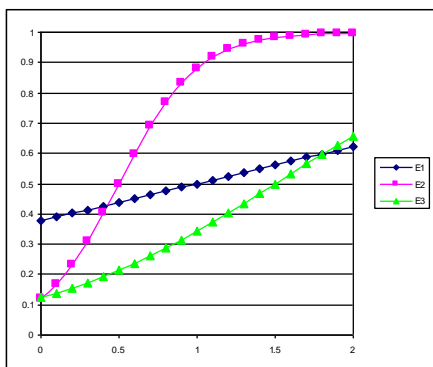
3

Контрольная работа № 1:

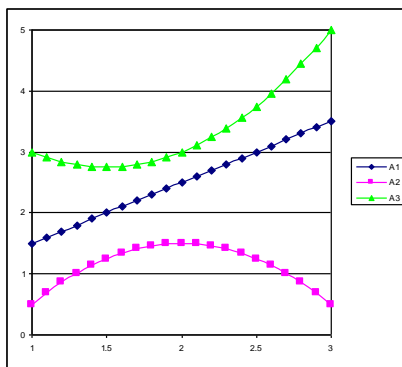
Вариант 17

1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
2. Качество моделей: предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E2. Ответ обоснуйте.
4. Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.

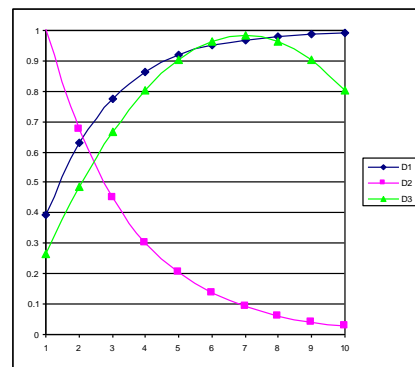
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой среднеквадратическое отклонение имеет значение $RMSE = 0.25$? Ответ обоснуйте.
6. Предполагая типичный вид зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов, определите по рисунку 3 оптимальное число факторов. Ответ обоснуйте.



1



2

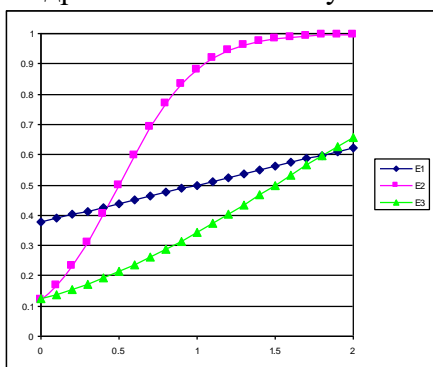


3

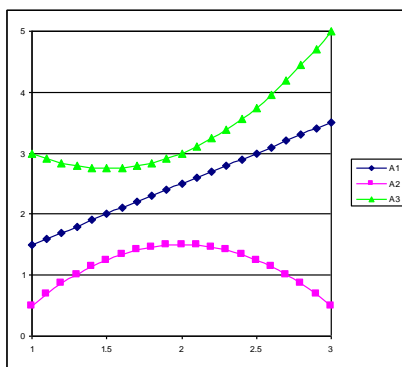
Контрольная работа № 1:

Вариант 18

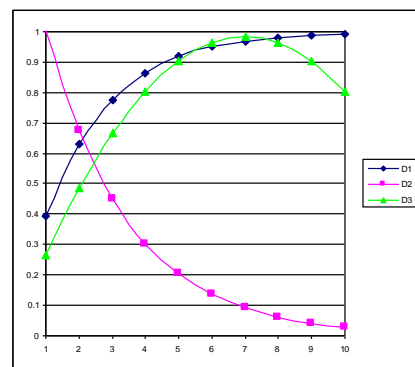
1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. Ответ обоснуйте.
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 коэффициент корреляции имеет значение $R = 0.45$? 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

Контрольная работа № 1:

Вариант 19

1. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура-активность».
2. Моделирование нелинейных зависимостей. Искусственные нейронные сети как гибкий

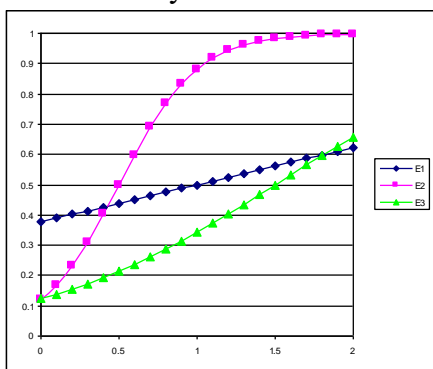
общий метод моделирования нелинейных зависимостей на основе упрощенных представлений об обработке информации в мозге человека и животных.

3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.

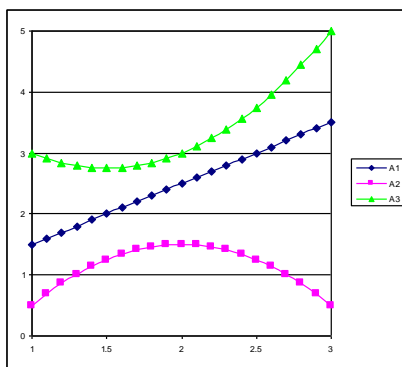
4. Какой вид зависимости активности от липофильности среди представленных на рисунке 2 обычно не встречается? Ответ обоснуйте.

5. Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.85$? Ответ обоснуйте.

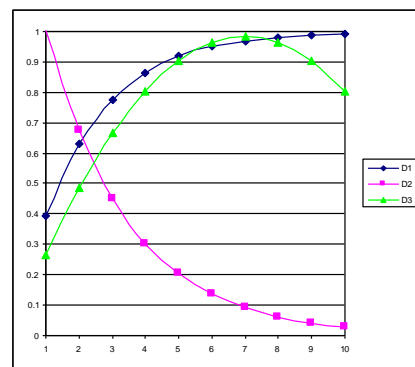
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



2



3

Контрольная работа № 1:

Вариант 20

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики.

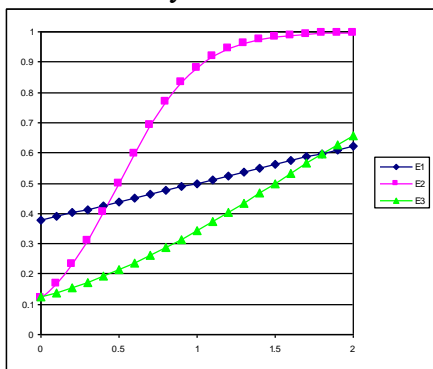
2. Регрессия частичных наименьших квадратов.

3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E1. Ответ обоснуйте.

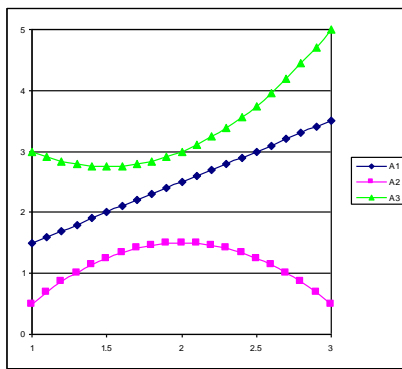
4. Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.

5. Что можно сказать о качестве модели, для которой среднеквадратическое отклонение имеет значение $RMSE = 1.5$? Ответ обоснуйте.

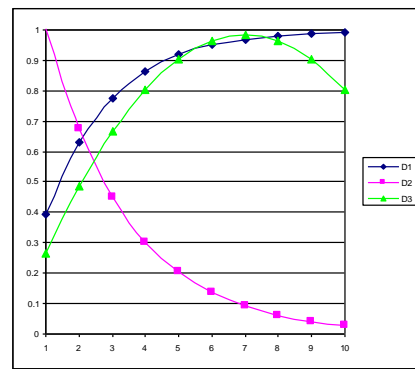
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости коэффициента корреляции от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



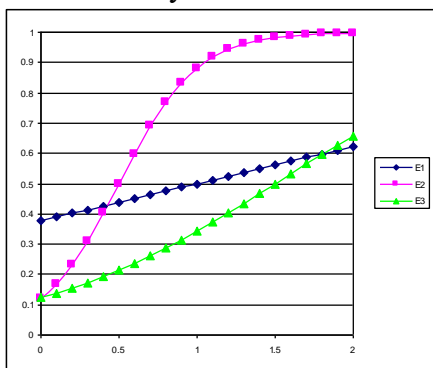
2



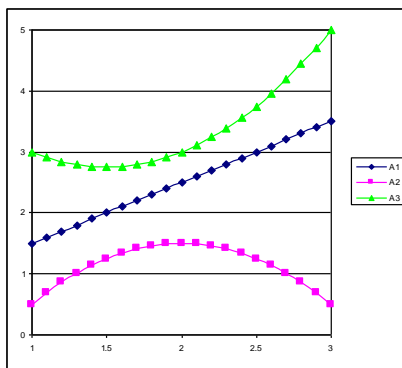
3

6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов?

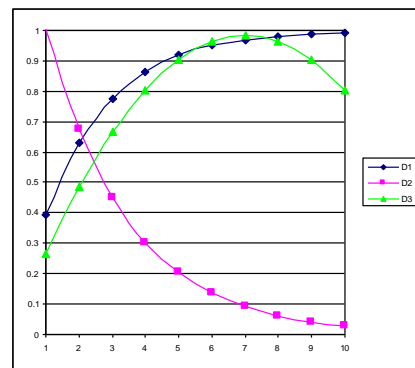
Ответ обоснуйте.



1



2



3

Контрольная работа № 2:

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.

Контрольная работа № 2:

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 № 2:

Вариант 3

1. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для метилкубана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,4-диметилциклогексана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для 2,3-диаминобутана.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 2,5-диметилгексана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: COC(=O)C1CCCC1I.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 3-хлор-4-метилпиррол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-метилиндола, 3-этилиндола и 3-фтор-5-метилиндола.

Контрольная работа № 2:

Вариант 4

1. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла.
2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{rc}$ для 2,5-диметилгексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для 1,1-диметилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 2-метилбутана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для аланина.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для кубана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: OC(=O)CCc1cccc(F)c1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): (2,3-диметилциклопропил)карбинол.
9. Построить молекулярный суперграф для 3-метилиндола, 4-хлориндола и 4-метокси-6-метилиндола.

Контрольная работа № 2:

Вариант 5

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для 1,1-диметил-4-этилциклогексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для диэтилкетона.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,4-диметилциклогексана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для *N,N*-диметилмочевины.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 1,1,2-триметилциклобутана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: NCC1CCCC(C1)N(=O)=O.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число

водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): 1-аза-2,4-диметил-3-метиленциклобутан.
9. Построить молекулярный суперграф для 3-фторхинолина, 5-метоксихинолина и 3-метил-5-этилхинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 6

1. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1-метил-4-этилцилогексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для тетрагидрофурана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для неопентана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для 2-аминотетрагидрофурана.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для 1,2,4-триметилциклопентана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: FC1CCC(CC#N)C1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): фурфурол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилнафталина, 2-метил-3-бромнафталина и 1-нитронафталина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 7

1. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1,1-диметилциклобутана.
3. Рассчитать индекс Винера W для диэтилкетона.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 1,2-диметилциклопропана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для этилацетата.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для кубана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: NC1CCCC(C1)C#N.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): 3-метоксифуран.
9. Построить молекулярный суперграф для 3-фториндола, 5-метоксииндола и 3-метил-5-этилиндола.

Контрольная работа № 2:

Вариант 8

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности ${}^3\chi_c$ для тетраэдрана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклобутана.

4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для неопентана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для морфолина.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для диоксана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: Nc1ccccc1CC#N.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 2-гидроксиметилфуран.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилхинолина, 2-метил-7-бромхинолина и 2-нитрохинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 9

1. Типы дескрипторов молекулярной структуры.
2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{pc}$ для 1,1-диметилциклобутана.
3. Рассчитать индекс Винера W для диэтилкетона.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 2-метилбутана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для 3-гидрокситетрагидрофурана.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 1,2,4-триметилциклопентана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: OC1CCCC1N(=O)=O.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 3-хлор-1-метилпиррол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-гидроксиметилхинолина, 2-метил-7-хлорхинолина и 2-нитрозохинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 10

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для метилкубана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,2-диметилциклопропана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для этилацетата.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 1,1,2-триметилциклобутана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: CCOC(=O)Cc1cccc(O)c1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 1-нитрозопиррол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилнафталина, 7-метилхинолина и 2-нитронафталина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 11

1. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа

топологии молекулярного поля (MFTA).

2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{pc}$ для 3,6-диметилоктана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,2-диметилциклопентана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для N,N' -диметилмочевины.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для анилина.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: COC(=O)C1CCCC1I.
8. Определить виды и число фрагментов $p1$ - $p3$ (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, $Br-C=CH_2$): 1,1-дибром-2-этилциклопропан.
9. Построить молекулярный суперграф для 1-гидроксинафталина, 1-метиламинонафталина и 1-хлор-7-метилнафталина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 12

1. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для тетраэдрана.
3. Рассчитать индекс Винера W для 1,2,3-триметилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для метилциклобутана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для 2,3-диаминобутана.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для диизопропилового эфира.
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, $Br-C=CH_2$): 1-аза-2,4-диметил-3-фторциклобутан.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-нитрохинолина, 2-бром-3-хлорхинолина и 8-гидроксихинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 13

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для метилкубана.
3. Рассчитать индекс Винера W для 1,1-диметилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,2-диметилциклопропана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для 2-аминотетрагидрофурана.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 1,2,4-триметилциклопентана.
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, $Br-C=CH_2$): 3-хлор-4-метилпиррол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-метилиндола, 3-этилиндола и 3-фтор-5-метилиндола.

Контрольная работа № 2:

Вариант 14

1. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1,1-диметилциклобутана.
3. Рассчитать индекс Винера W для неопентана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 1,2,3-триметилциклопропана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для морфолина.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для анилина.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: FC1CCC(CC#N)C1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 2-аминометилфуран.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилхинолина, 2-метил-7-бромхинолина и 2-нитрохинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 15

1. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 2,5-диметилгексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 2-метилбутана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для N,N' -диметилмочевины.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для диизопропилового эфира.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: NCC1CCCC(C1)N(=O)=O.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): (2,3-диметилциклопропил)карбинол.
9. Построить молекулярный суперграф для 3-метилиндола, 4-хлориндола и 4-метокси-6-метилиндола.

Контрольная работа № 2:

Вариант 16

1. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1,1,3-триметилциклопентана.
3. Рассчитать индекс Винера W для 1,1-диметилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 1,2-диметилциклобутана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для γ -бутиролактона.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для 1,2,4-триметилциклопентана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: OC(=O)CCc1cccc(F)c1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число

водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): 1-аза-2,4-диметил-3-метиленциклобутан.

9. Построить молекулярный суперграф для 3-фторхинолина, 5-метоксихинолина и 3-метил-5-этилхинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 17

1. 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.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1-метил-4-этилциклогексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для метилциклобутана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для этилацетата.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для 2,5-диметилгексана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: OC1CCCC1N(=O)=O.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): 2-бром-1-метилпиррол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-гидроксиметилхинолина, 2-метил-7-хлорхинолина и 2-нитрозохинолина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 18

1. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 2,5-диметилгексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 1,2-диметилциклобутана.
5. Рассчитать индекс связности ${}^1\chi^V$ для 2,3-диаминобутана.
6. Рассчитать индекс Рандича ${}^1\chi$ для 1,1,2-триметилциклобутана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: NC1CCCC(C1)C#N.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$): фурфурол.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилнафталина, 2-метил-3-бромнафталина и 1-нитронафталина.

Контрольная работа № 2:

Вариант 19

1. Типы дескрипторов молекулярной структуры.
2. Рассчитать индекс связности ${}^4\chi_{pc}$ для 1-метил-4-этилциклогексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для 1,3-диметилциклобутана.
4. Рассчитать индекс связности ${}^2\chi$ для 1,2-диметилциклопропана.

5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для *N,N'*-диметилмочевины.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для кубана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: Nc1ccccc1CC#N.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 3-метоксифуран.
9. Построить молекулярный суперграф для 3-фториндола, 5-метоксииндола и 3-метил-5-этилиндола.

Контрольная работа № 2:

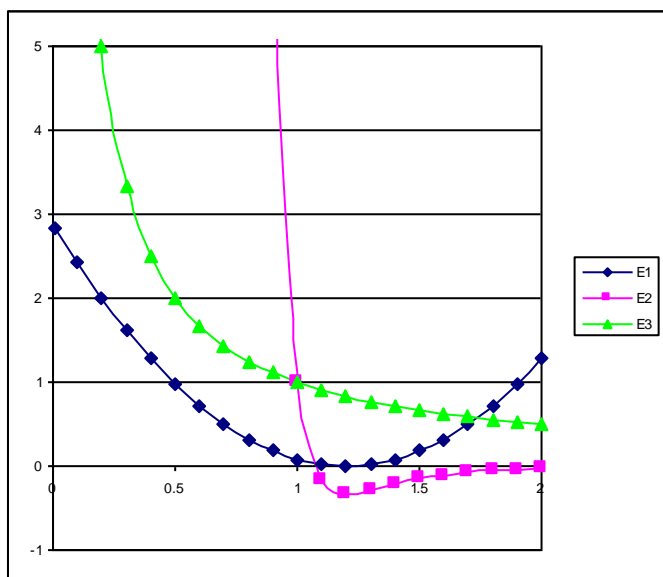
Вариант 20

1. 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.
2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{rc}$ для 2,5-диметилгексана.
3. Рассчитать индекс Винера W для метилциклопропана.
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 2-метилбутана.
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для γ -аминомасляной кислоты.
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 1,1,2-триметилциклобутана.
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: CCOC(=O)Cc1cccc(O)c1.
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 2-гидроксиметилфуран.
9. Построить молекулярный суперграф для 2-аминометилхинолина, 2-метил-7-бромхинолина и 2-нитрохинолина.

Контрольная работа № 3:

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 токсифорных 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.

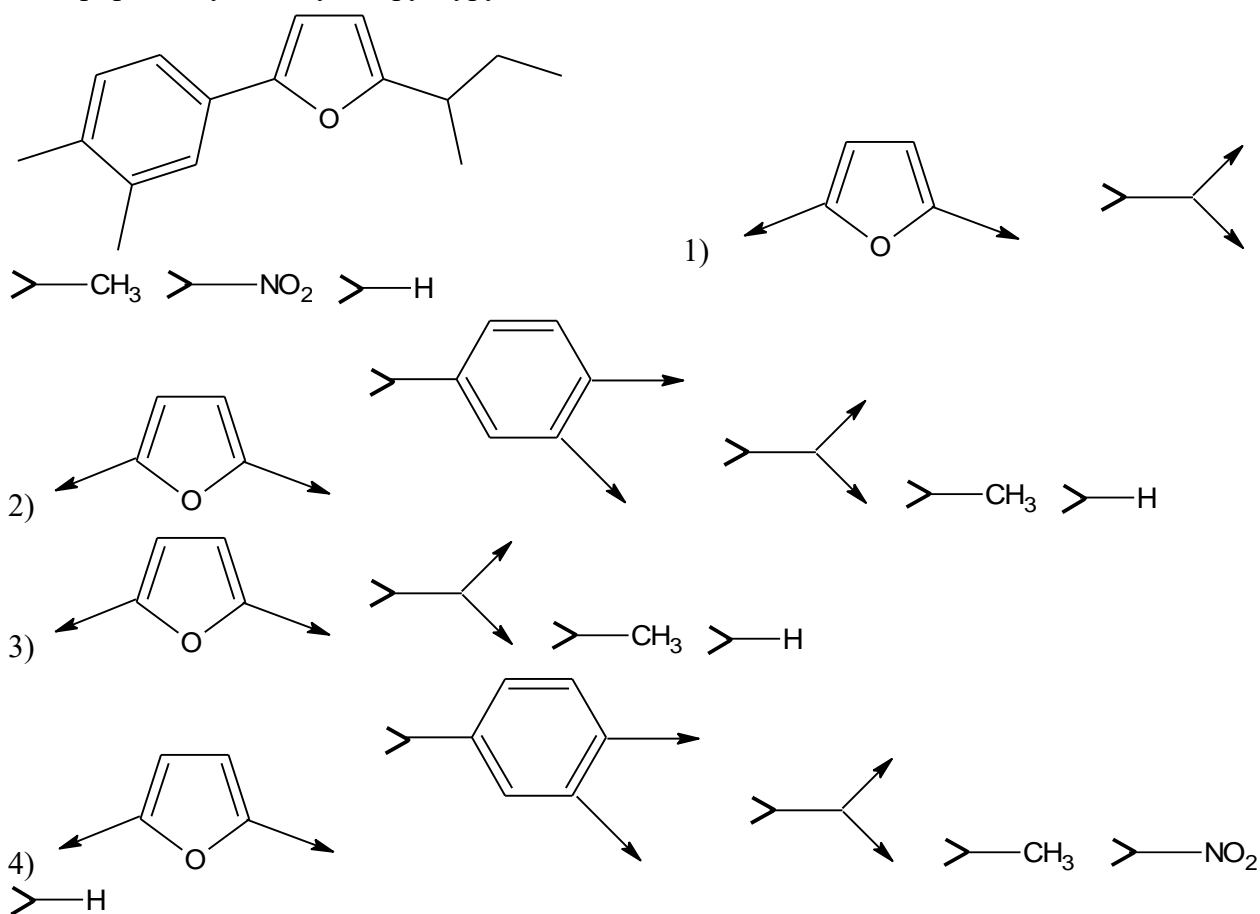


4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

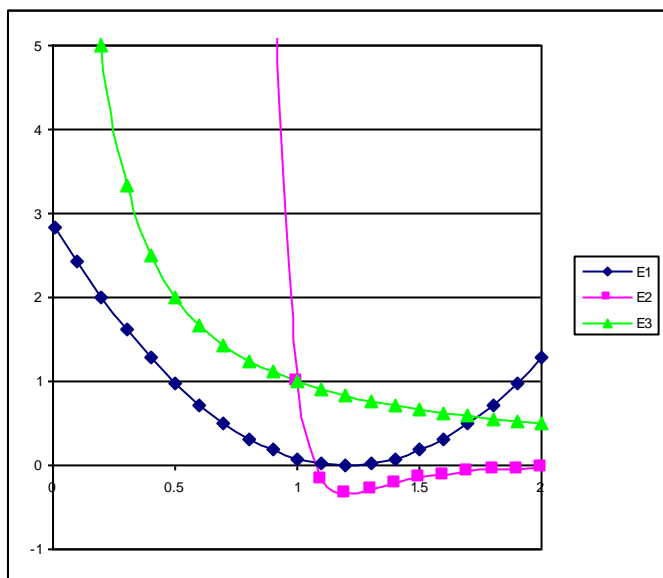
VVTLAWHVKGRLVP--TYLS

VVT---HVKVRLVPGATFLS

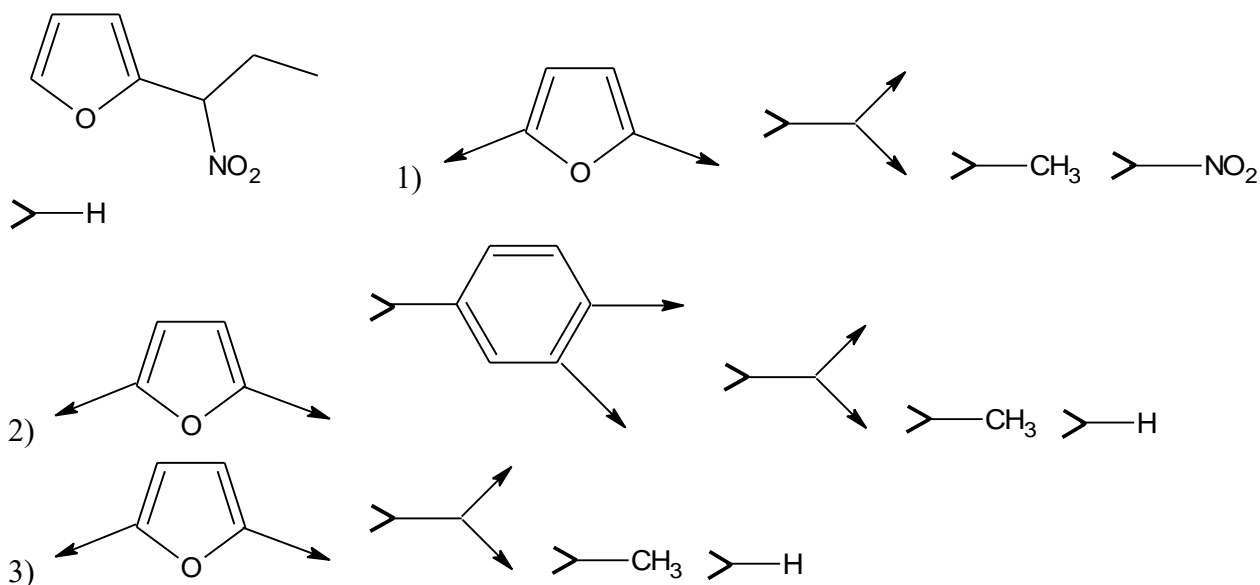
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

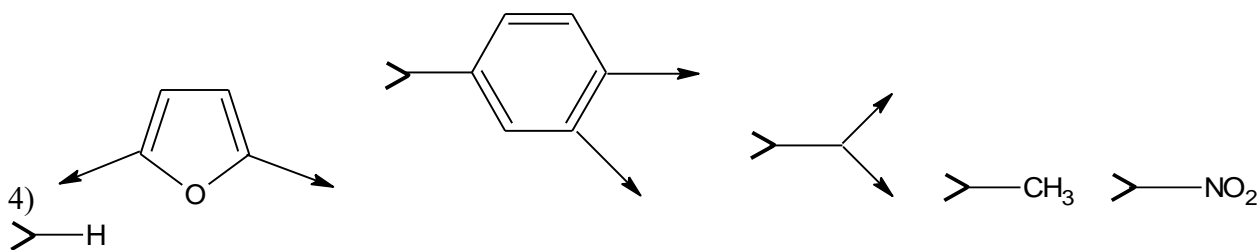


1. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени.
2. Направленное конструирование активных структур на основе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



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTLAWHVK---VPGATYLS
VVT-AYHVKGRLLVPGASYLS
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

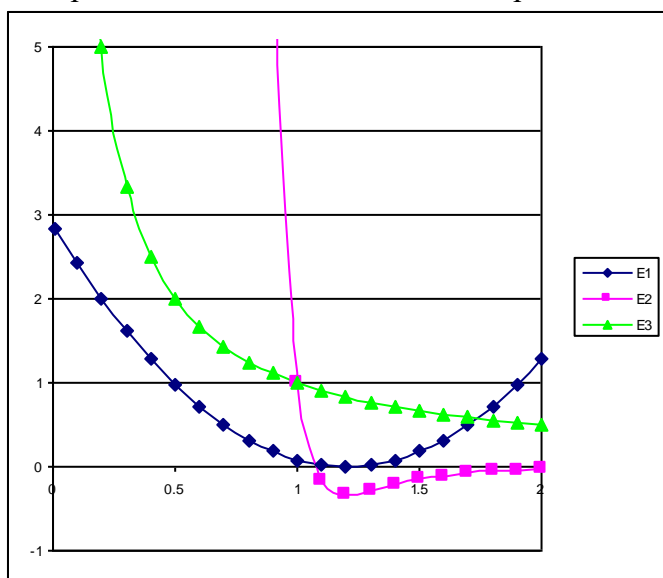




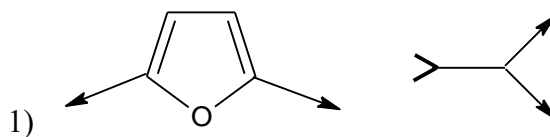
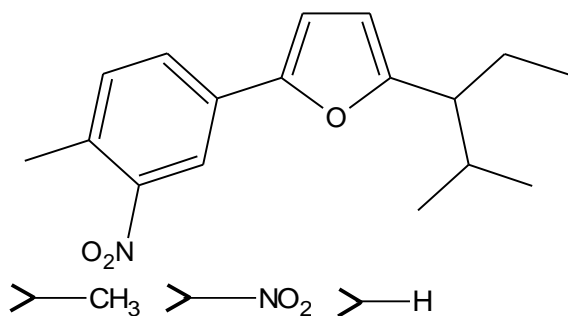
Контрольная работа № 3:

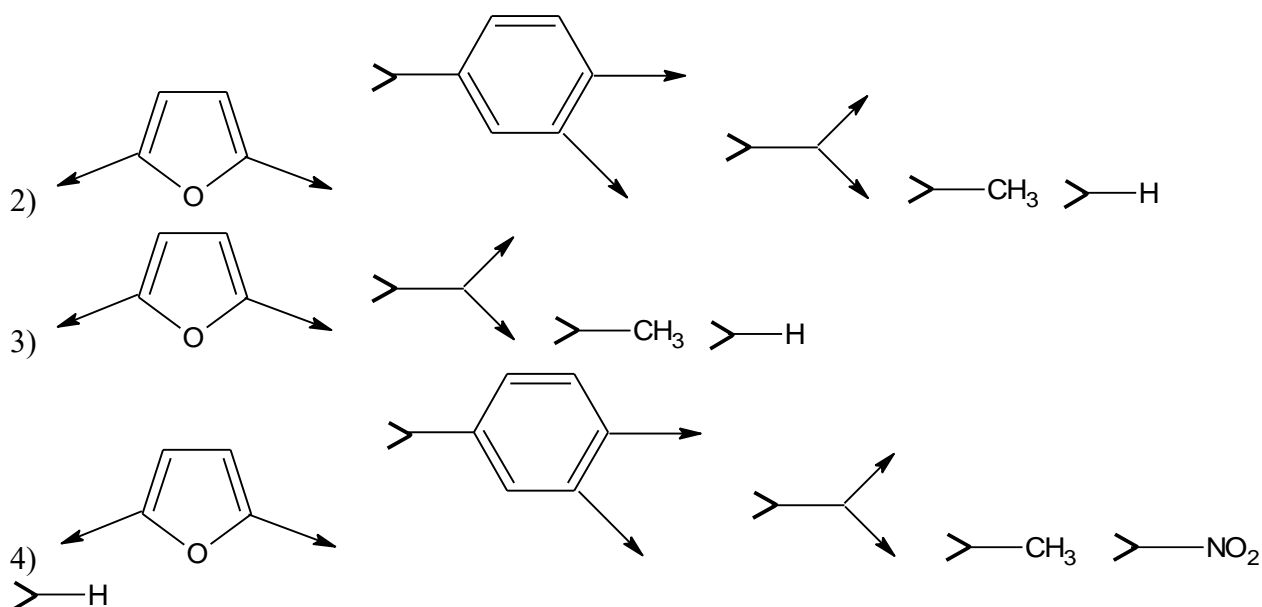
Вариант 3

1. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA.
2. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия разноименных зарядов? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVT LAW---GRLVPGATYLS
V-TAAWHVKGR LSPGASYLS
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

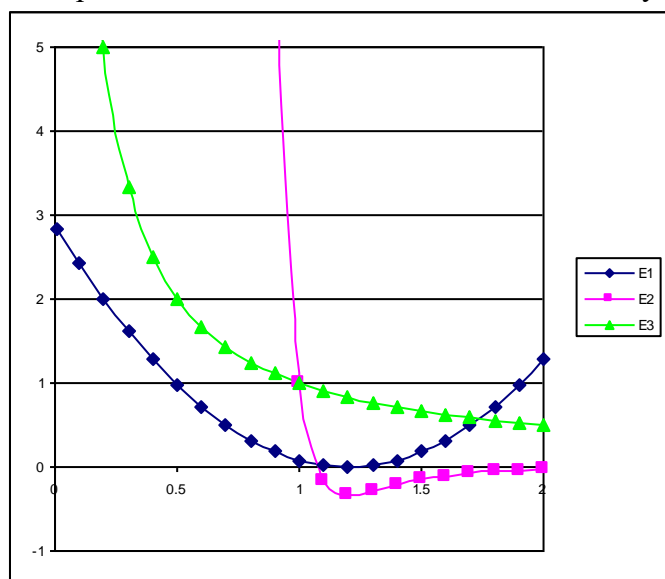




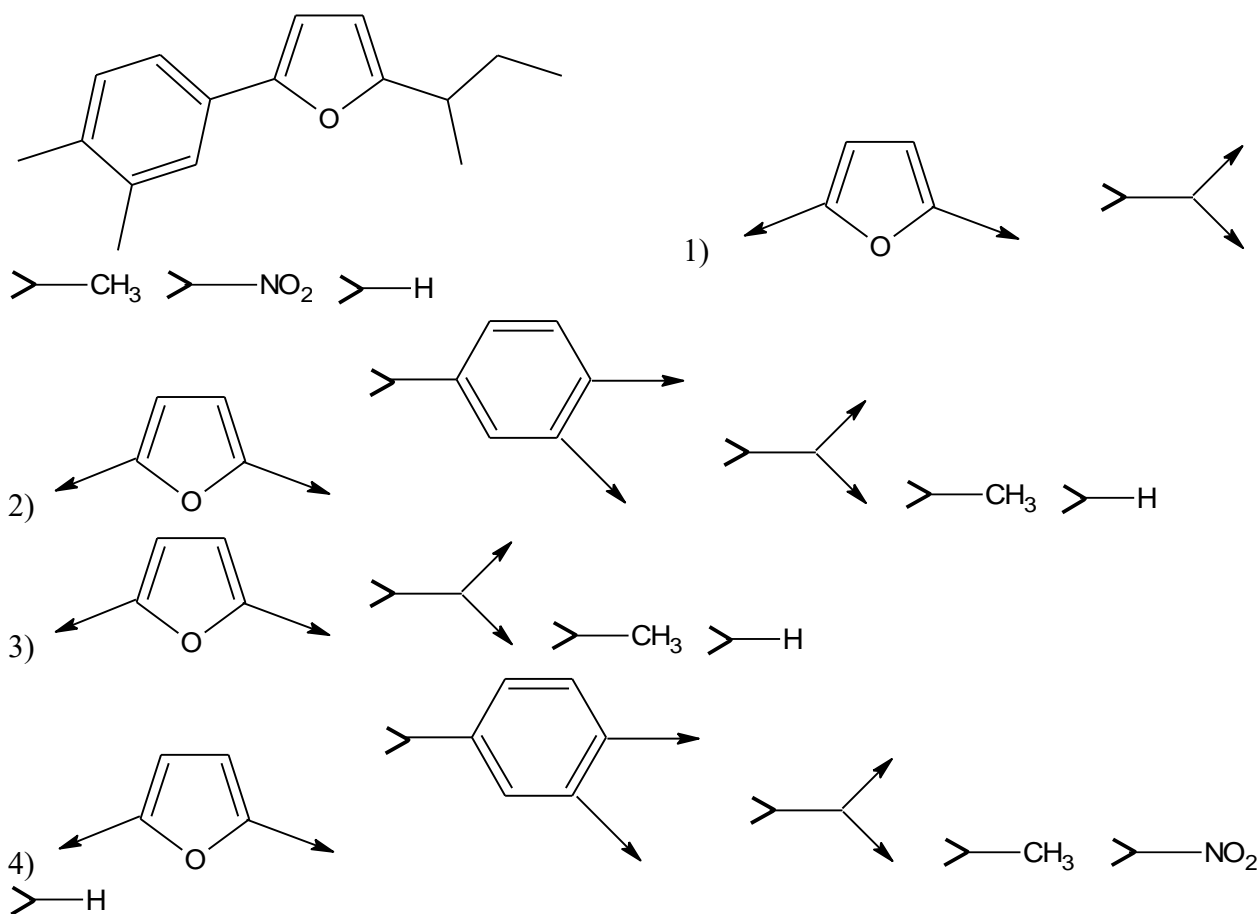
Контрольная работа № 3:

Вариант 4

1. Структура и функционирование белковых биомолекул биологически активных веществ. Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии.
2. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии вандерваальсова взаимодействия? Ответ обоснуйте.



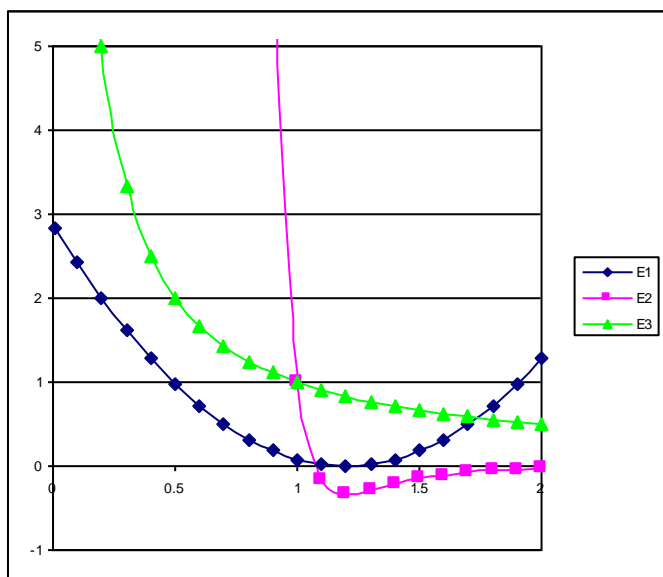
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVT--WHVKGR LVP GATYLS
VGT L AWP VKG --- PGATYLT
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?



Контрольная работа № 3:

Вариант 5

1. 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.
2. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия одноименных зарядов? Ответ обоснуйте.

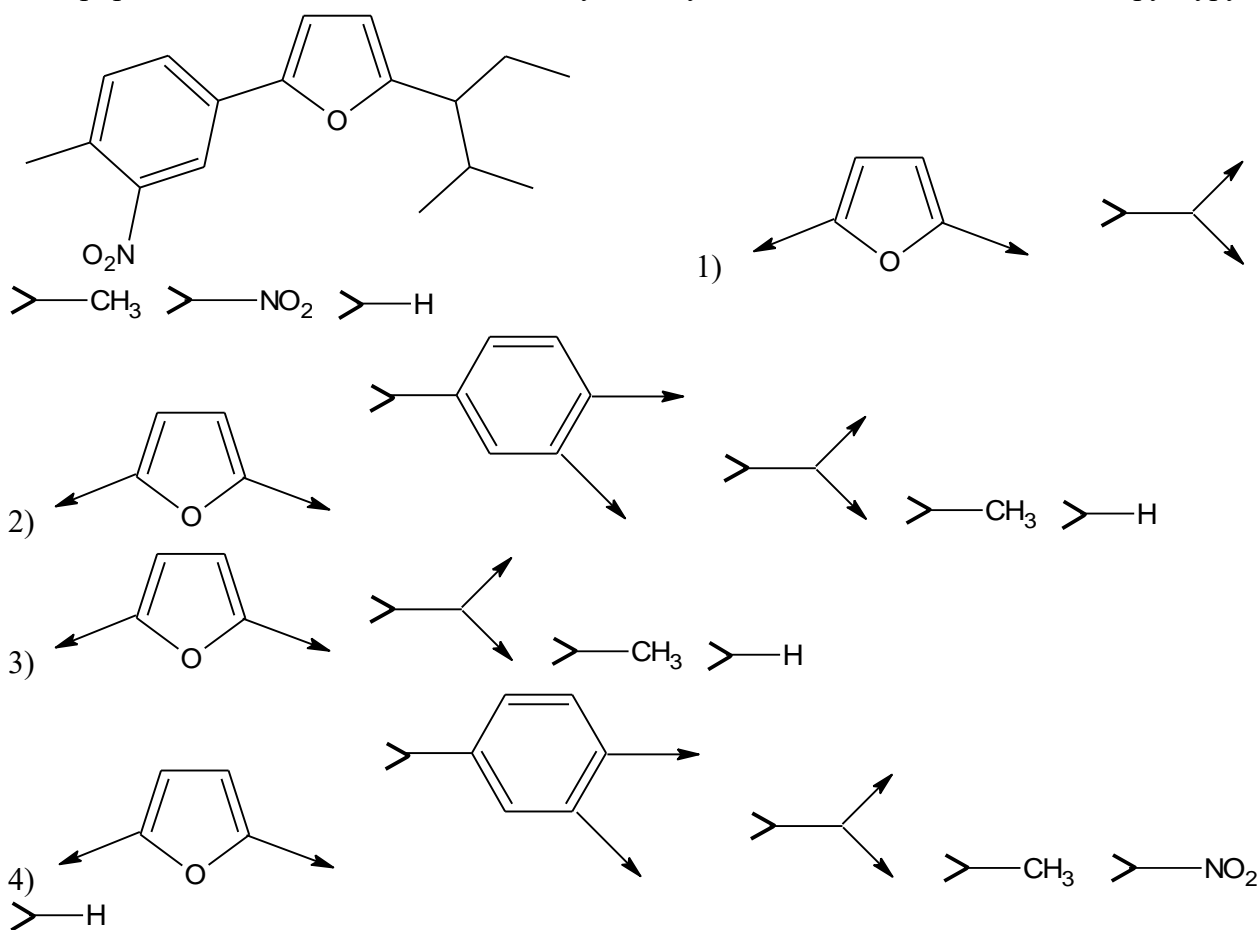


4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVTLAWHVKGKGR---GATYLS

VVTLAW-VRGRLVPGATYES

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



Контрольная работа № 3:

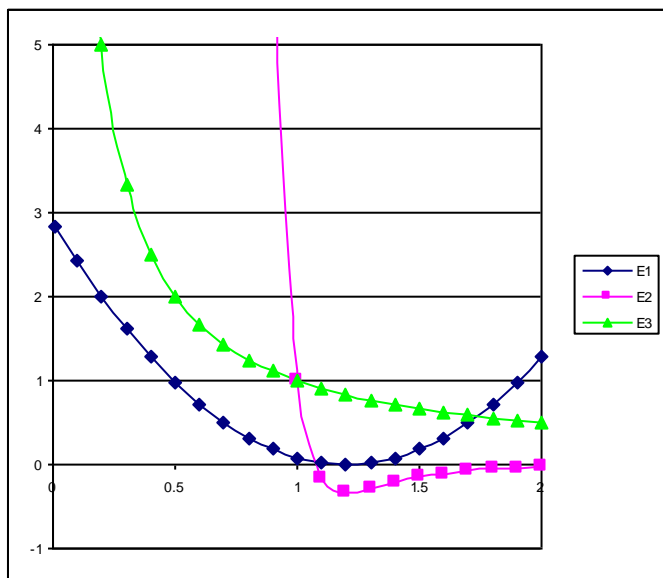
Вариант 6

1. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные

центры, учет формы молекул.

2. 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).

3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии деформации связей? Ответ обоснуйте.

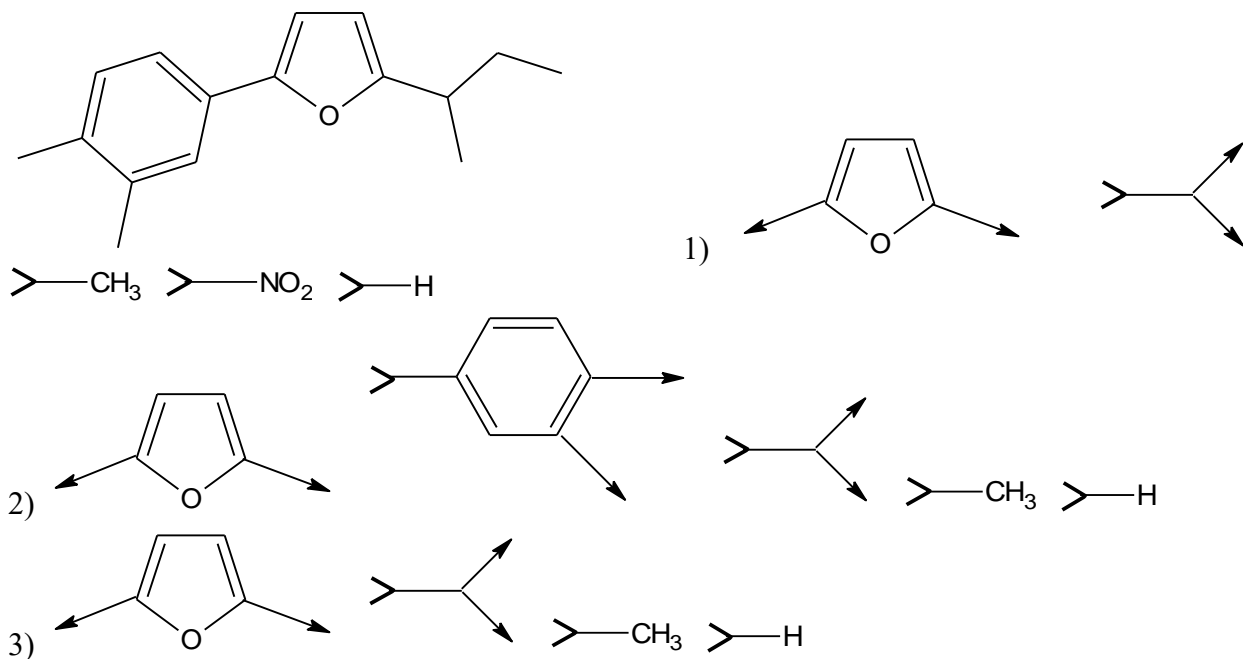


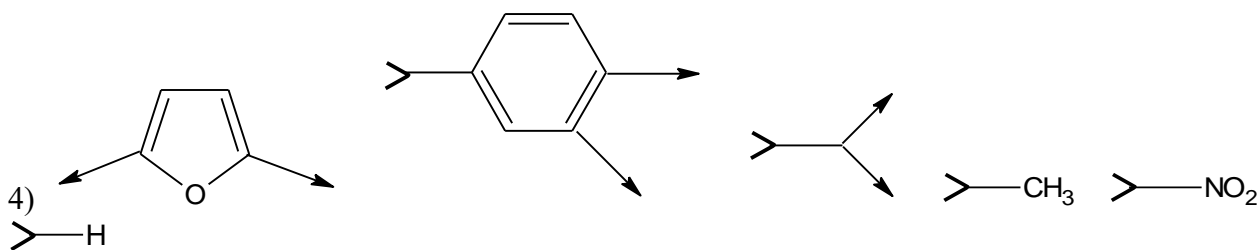
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVTLAW---GRLVPGATYLS

V-TAAWHVKGR LSPGASYLS

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

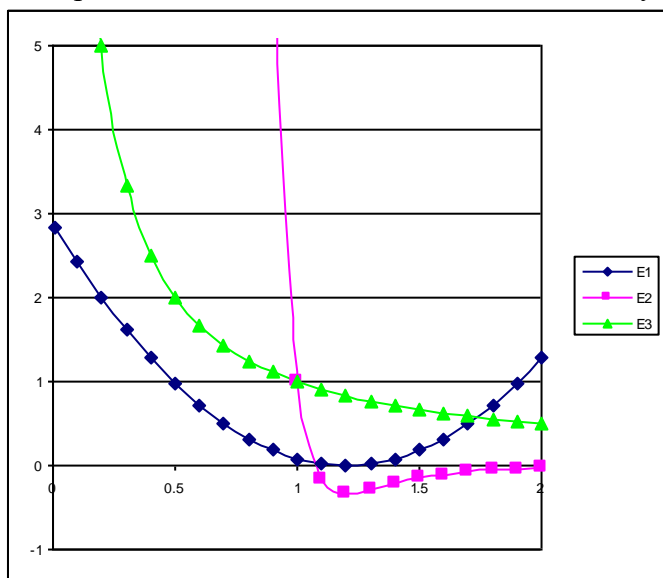




Контрольная работа № 3:

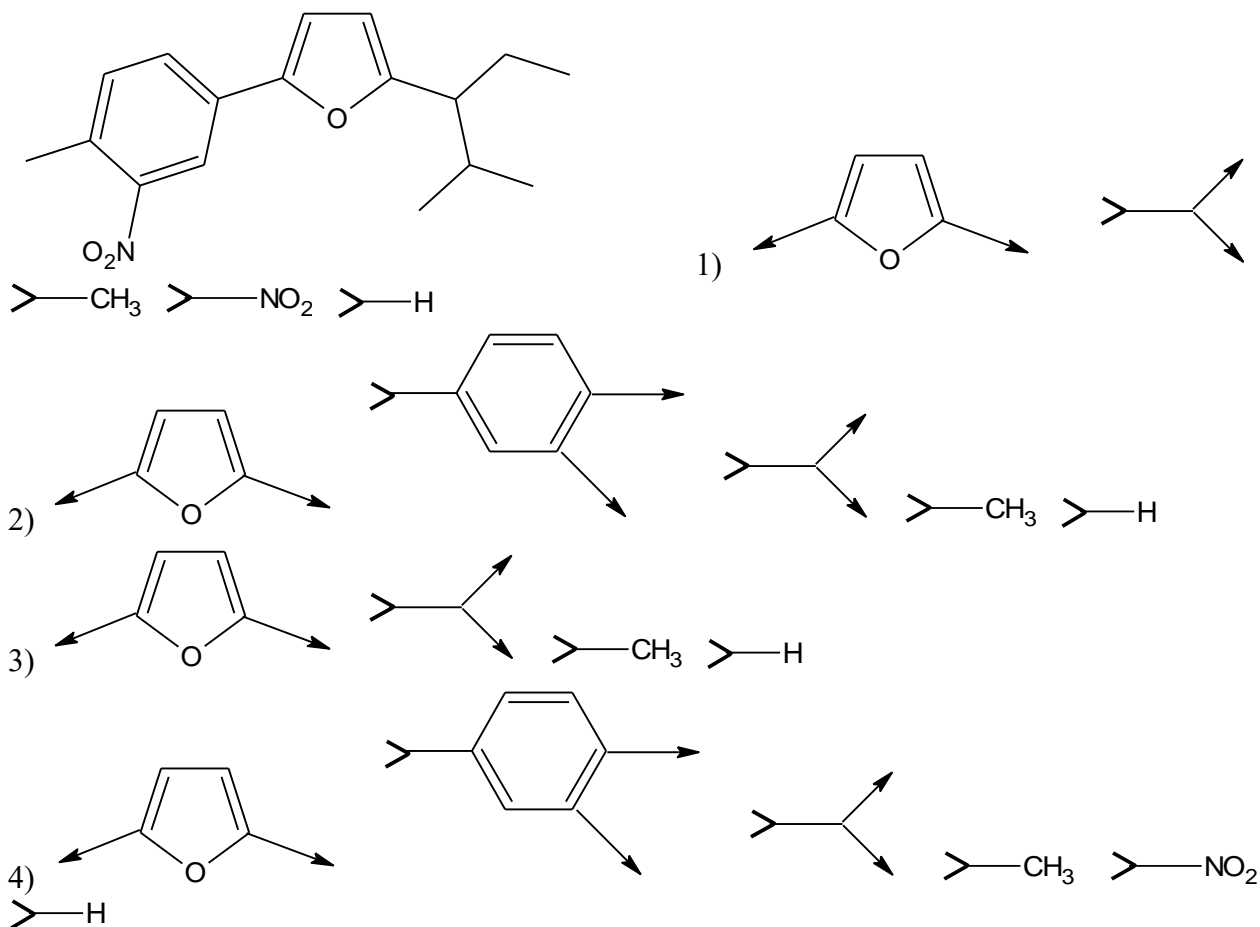
Вариант 7

1. 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.
2. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии вандерваальсова взаимодействия? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTL---VKGRLVPGATYLS
VVTLAWHVNGRLVPAAT-LS

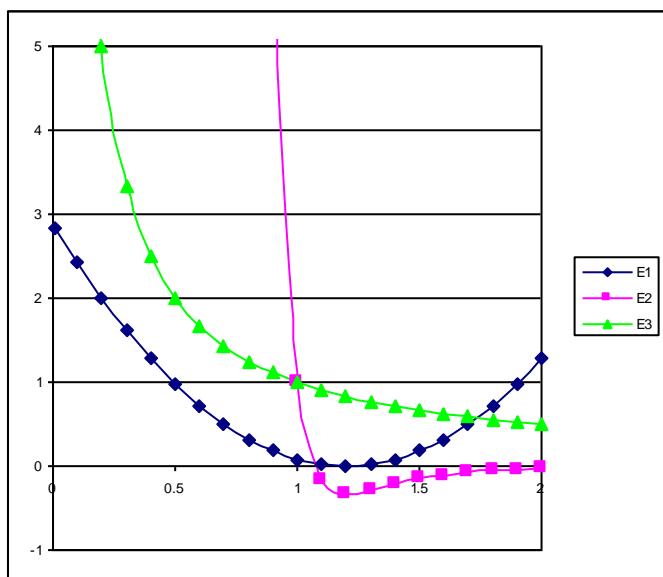
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?



Контрольная работа № 3:

Вариант 8

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

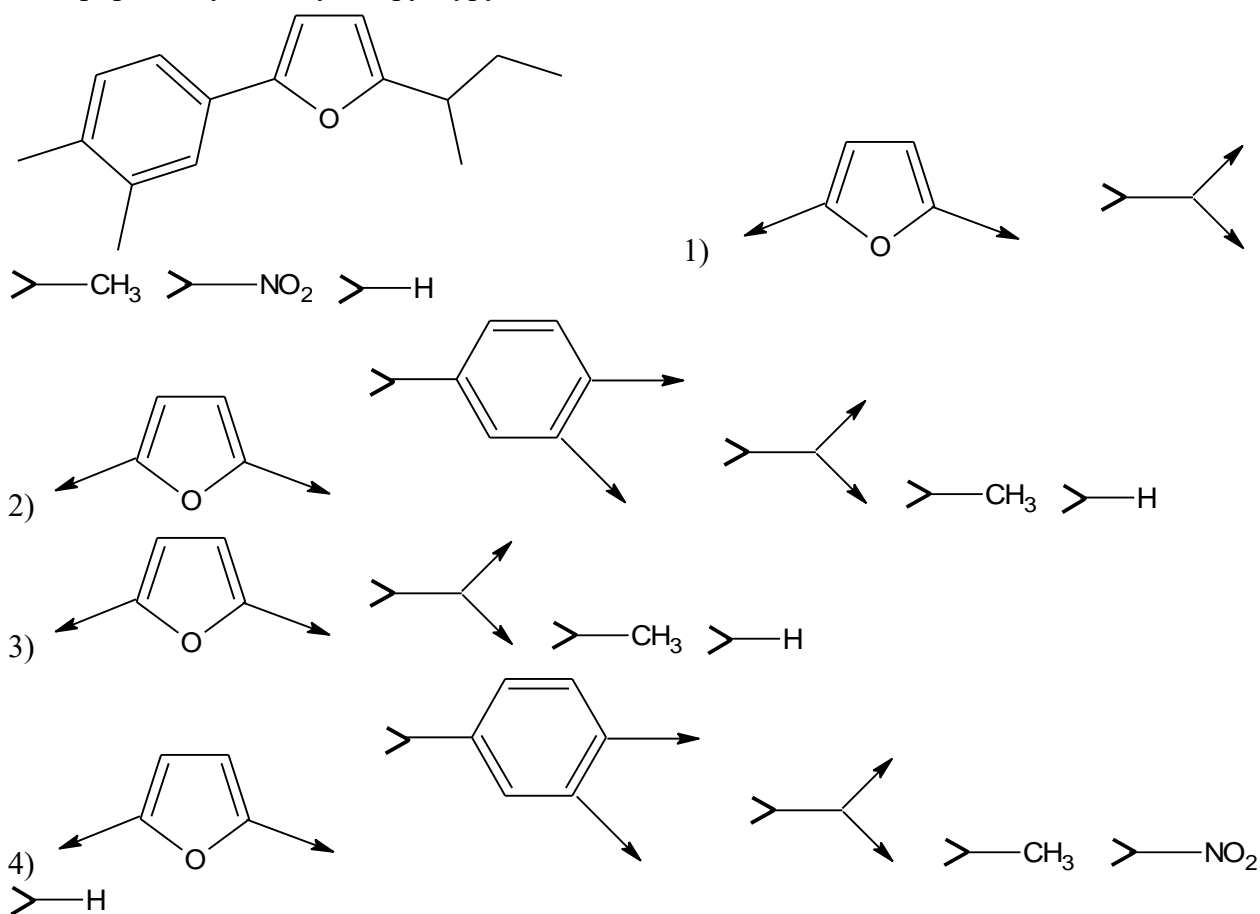


4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVT--WHVKGRLVPGATYLS

VGTLAWPVKG---PGATYLT

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



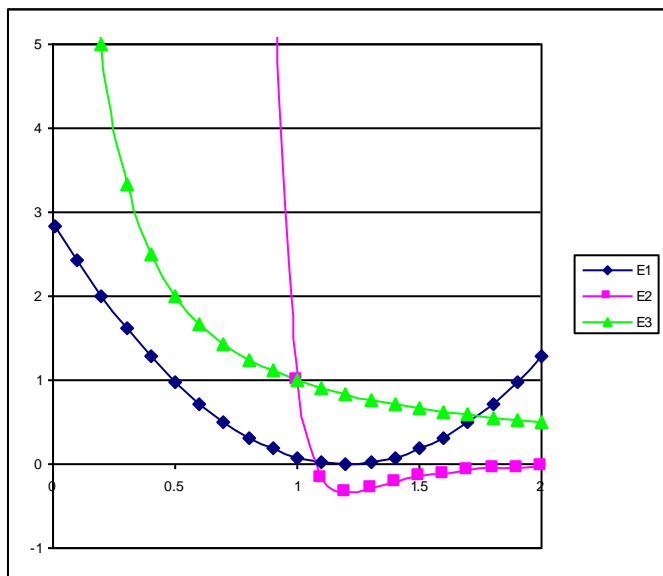
Контрольная работа № 3:

Вариант 9

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

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

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

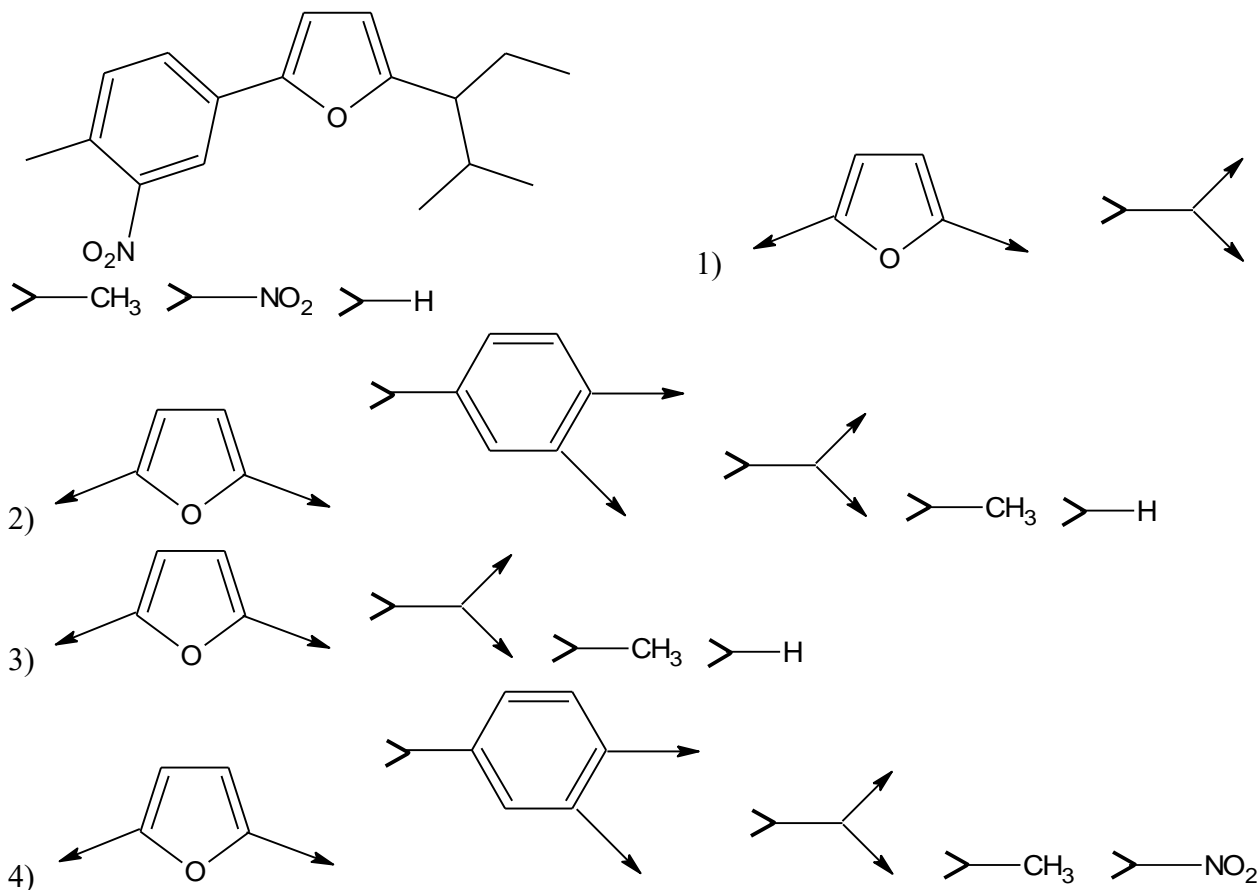


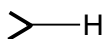
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVTLAWHVK---VPGATYLS

VVT-AYHVKGRLLVPGASYLS

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

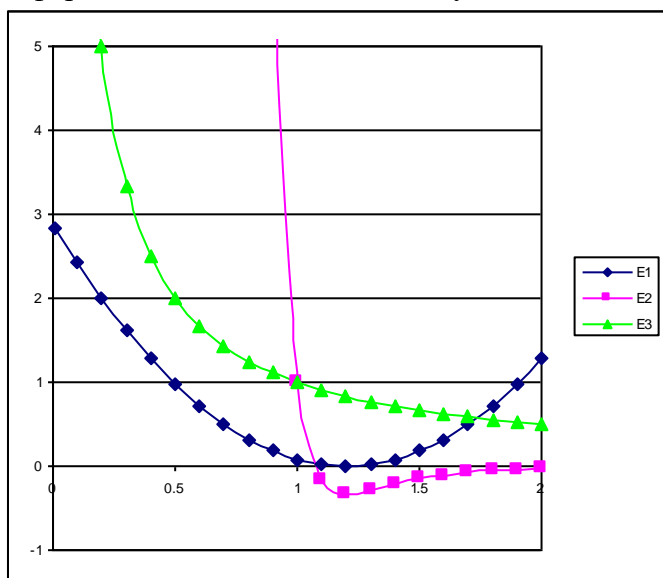




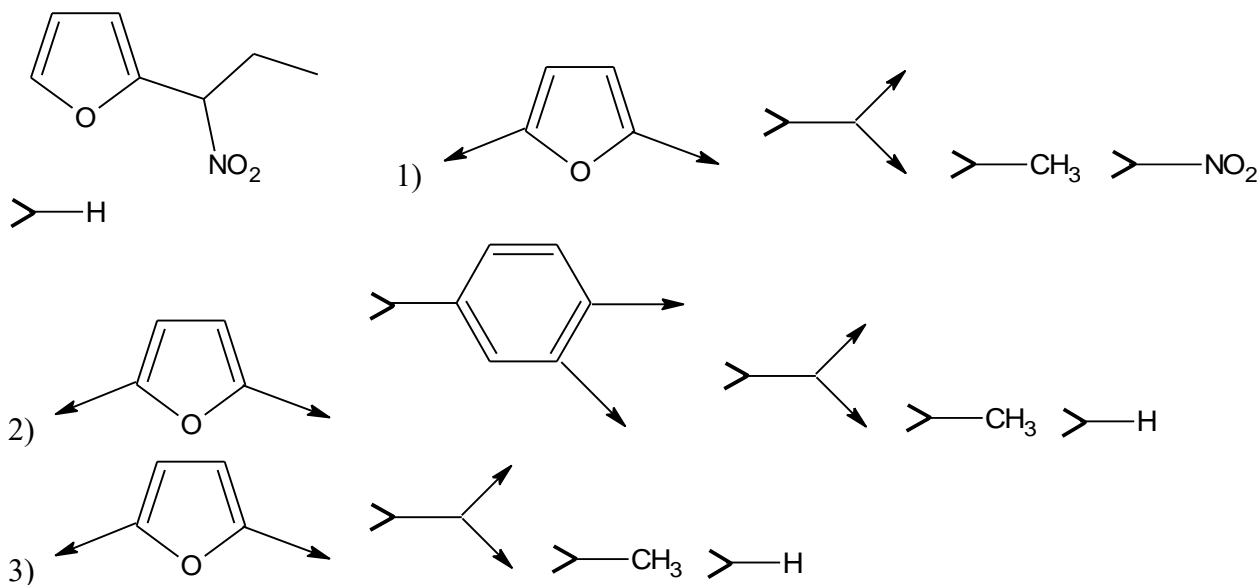
Контрольная работа № 3:

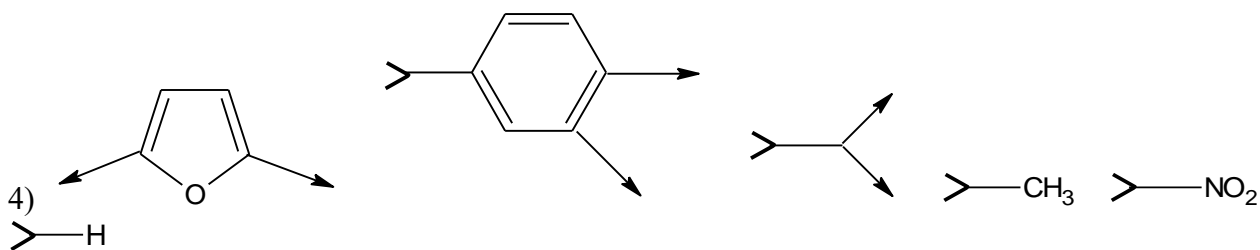
Вариант 10

- Молекулярная динамика – моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени.
- Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга.
- Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии деформации связей? Ответ обоснуйте.



- Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
 VVTL---VKGR LVP GAT YLS
 VVTLAWHVNGRLVPAAT-LS
- Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

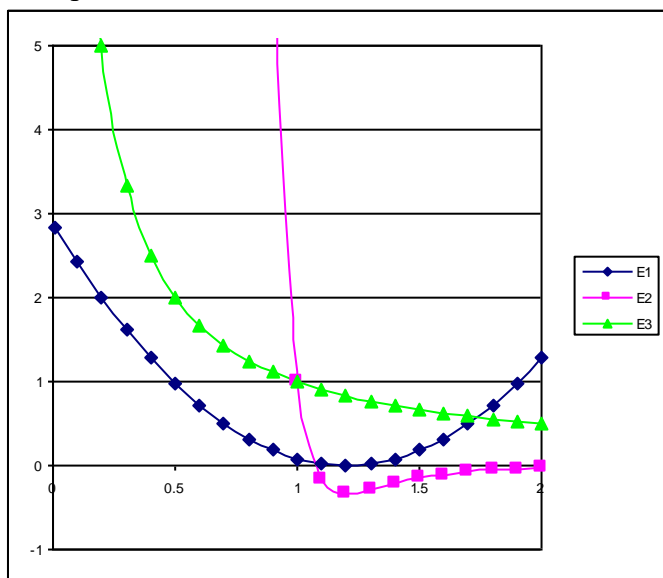




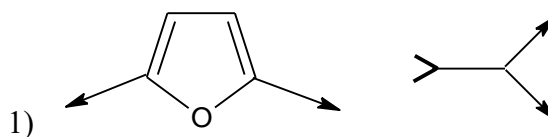
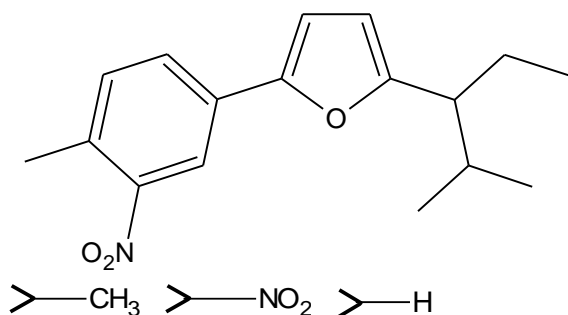
Контрольная работа № 3:

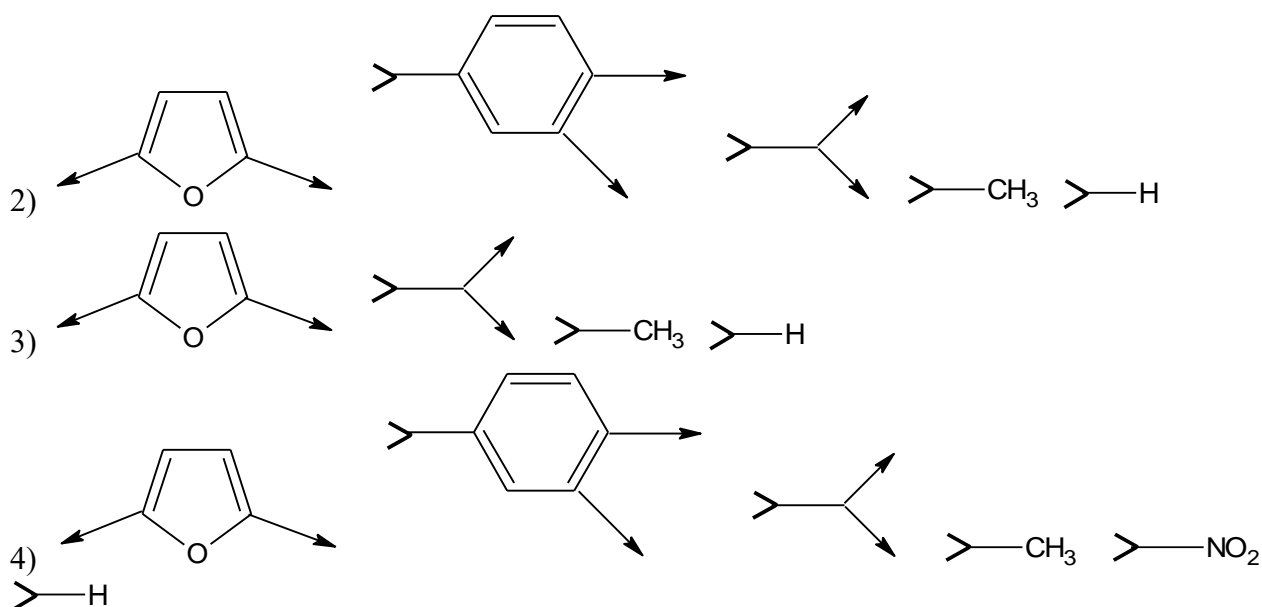
Вариант 11

1. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA.
2. Источники библиотек структур для виртуального скрининга: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия одноименных зарядов? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTLAWHVKGRLVP--TYLS
VVTLIWN--GRLIPGATSLS
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

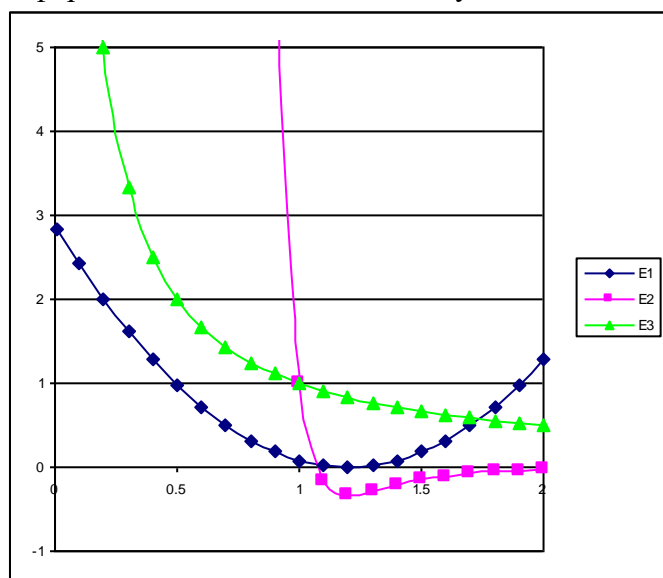




Контрольная работа № 3:

Вариант 12

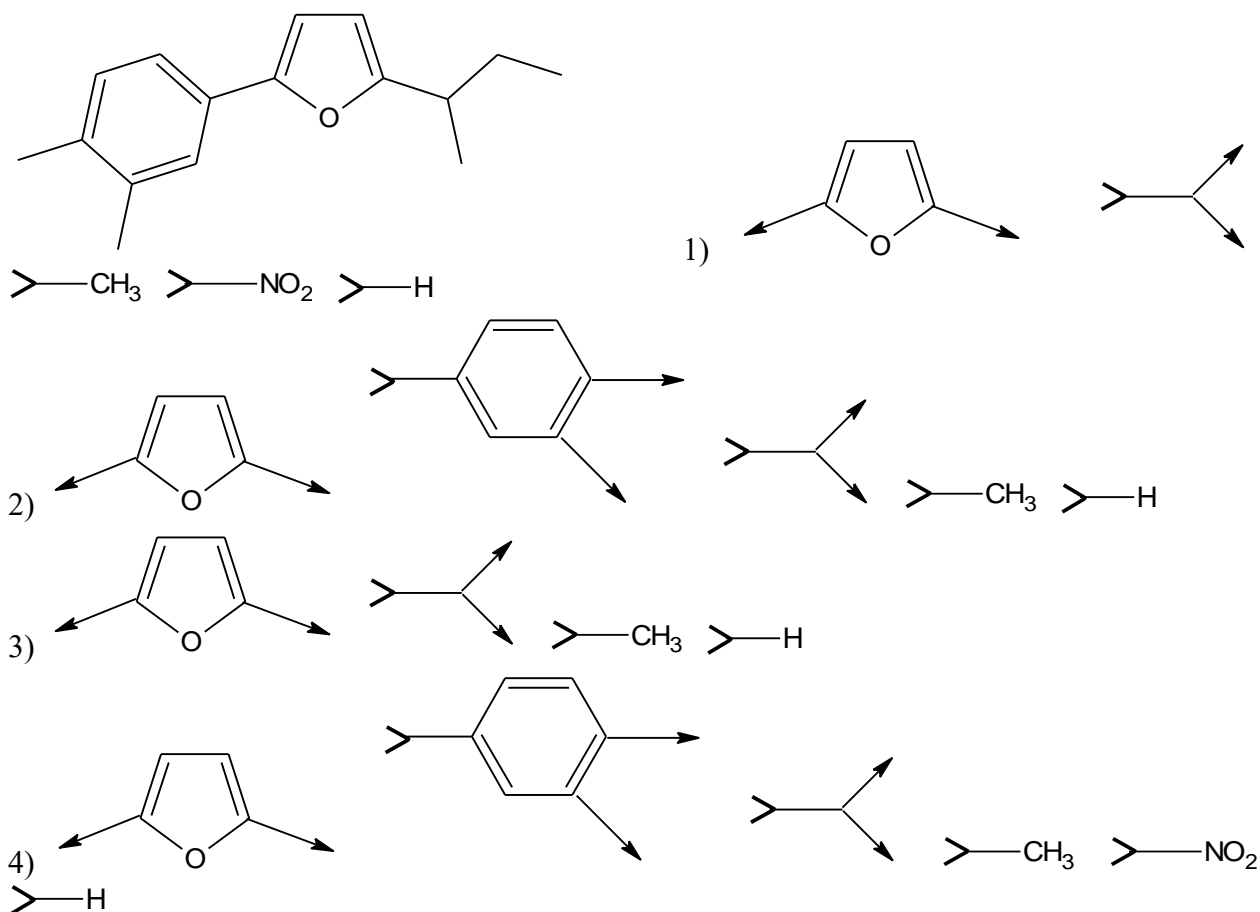
1. Структура и функционирование белковых биомиметических биологически активных веществ. Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии.
2. Виртуальный скрининг: многоуровневая специфическая фильтрация с использованием информации о структуре известных лигандов (прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям) и структуре биомиметики (молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени).
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.
VVTLAHVKGRLL--ATYLS
VVSLA-HAKGRLLVPGATYLT
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

VVTLAWHVKGRLVP--TYLS
VVTLIWH--GRLIPGATSLS

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



Контрольная работа № 3:

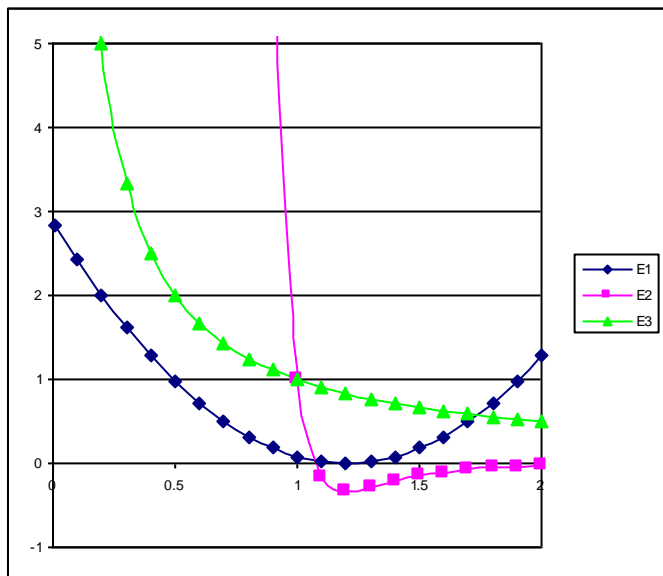
Вариант 14

1. Анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.
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 разноименных зарядов? Ответ обоснуйте.

движения системы во времени.

2. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга.

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

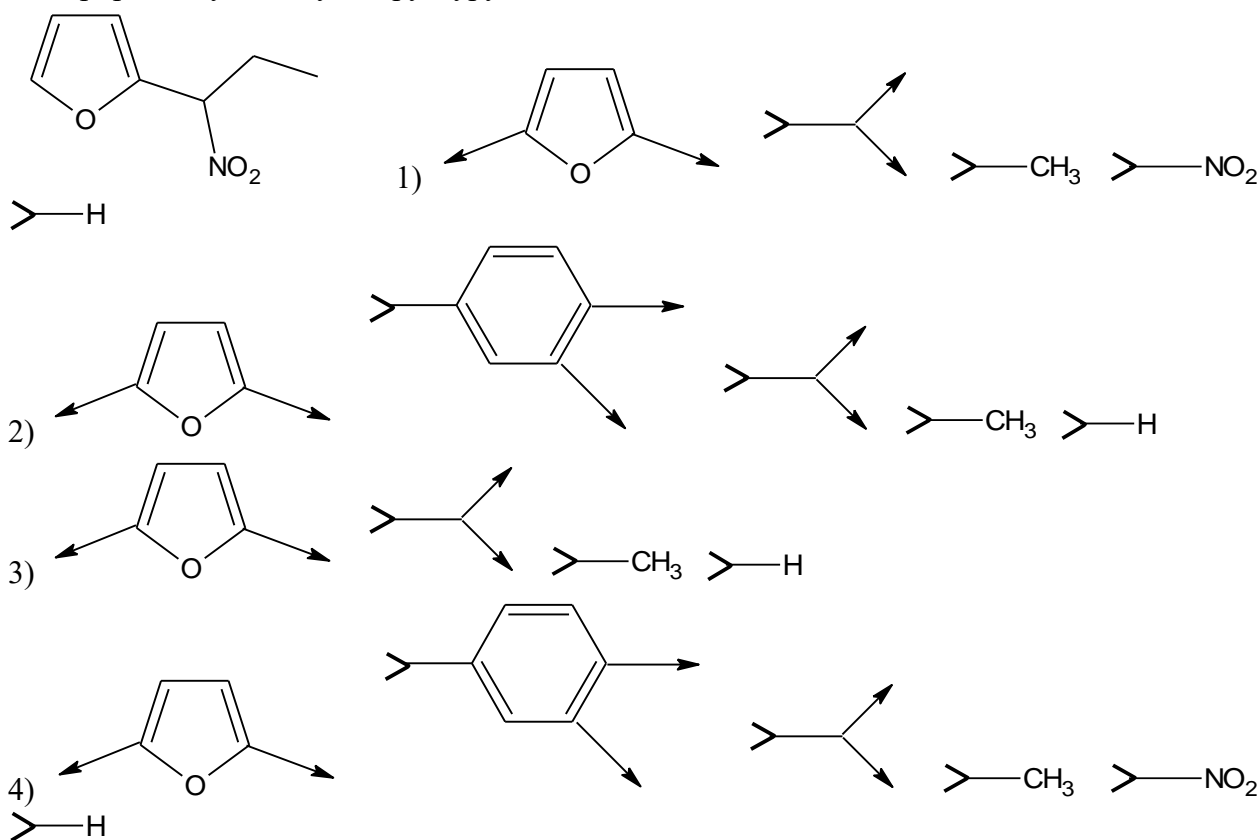


4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVTLAWHV---LVPGATYLS

VVTIAWHVKGRLLVHGA-YLS

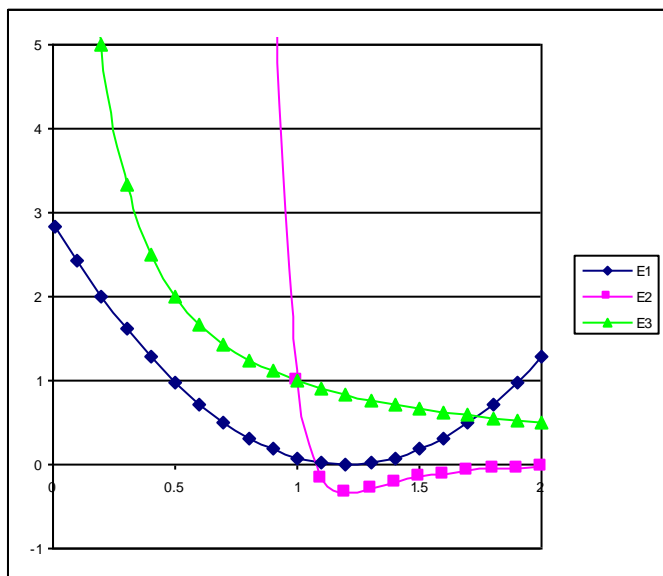
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?



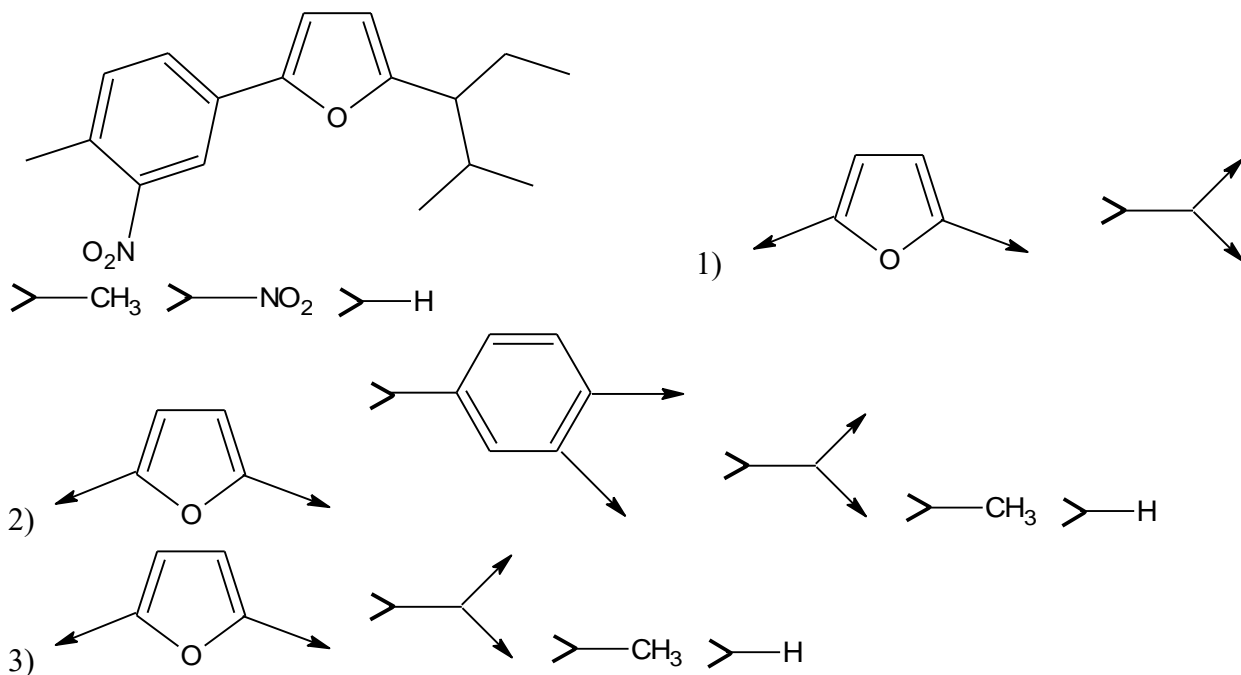
Контрольная работа № 3:

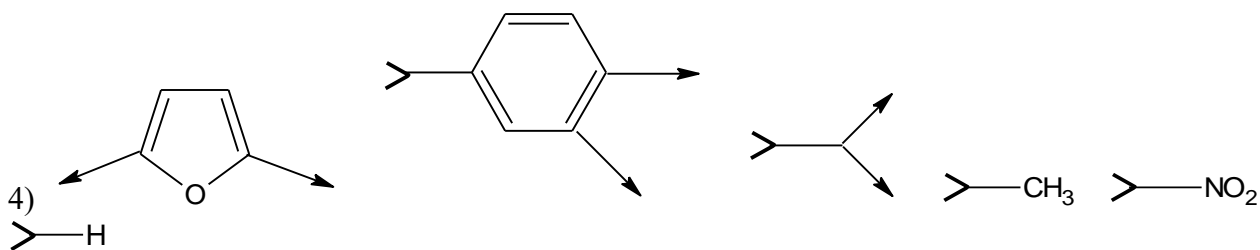
Вариант 16

1. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.
2. Источники библиотек структур для виртуального скрининга: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия разноименных зарядов? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTLAWHVKG--VPGATYLS
VLTL--HVKGR LVPGGTYLS
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

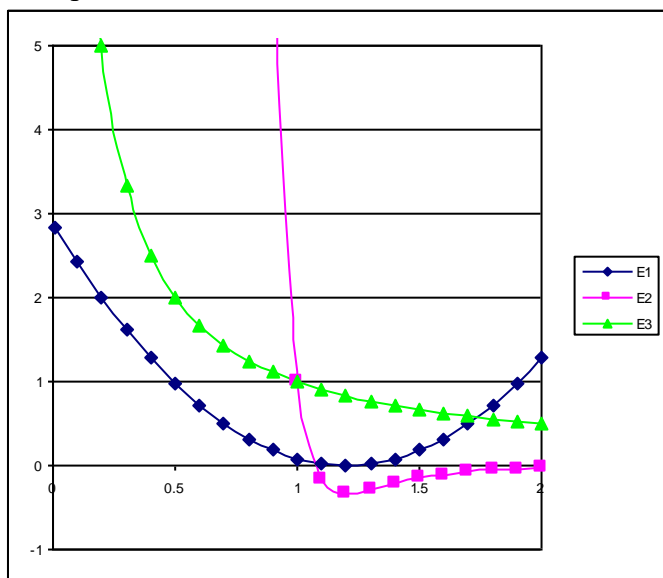




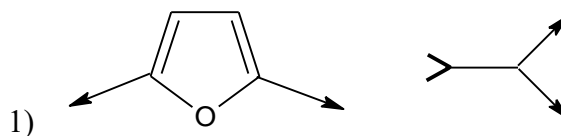
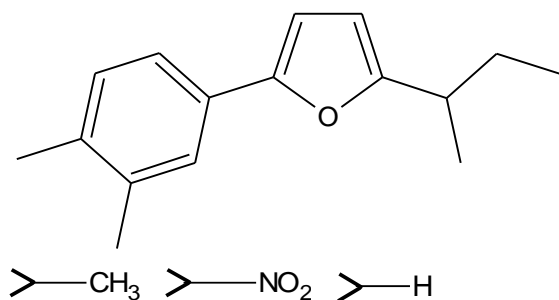
Контрольная работа № 3:

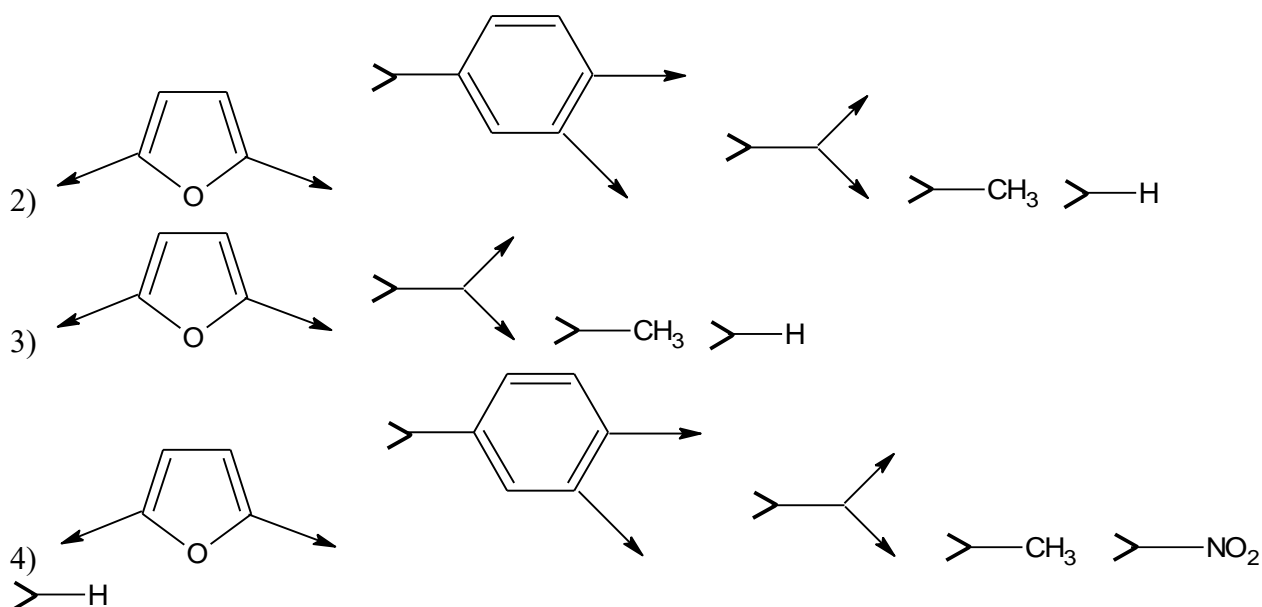
Вариант 17

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



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTLAHWVKGR---GATYLS
VVTLAW-VRGRLVPGATYES
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?

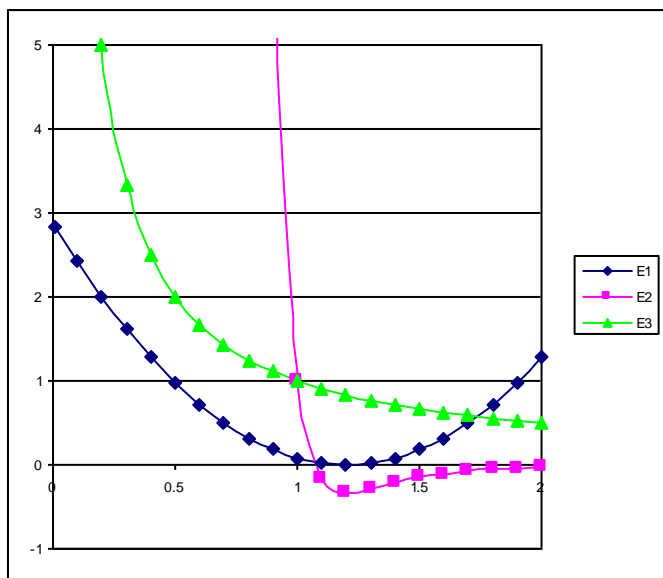




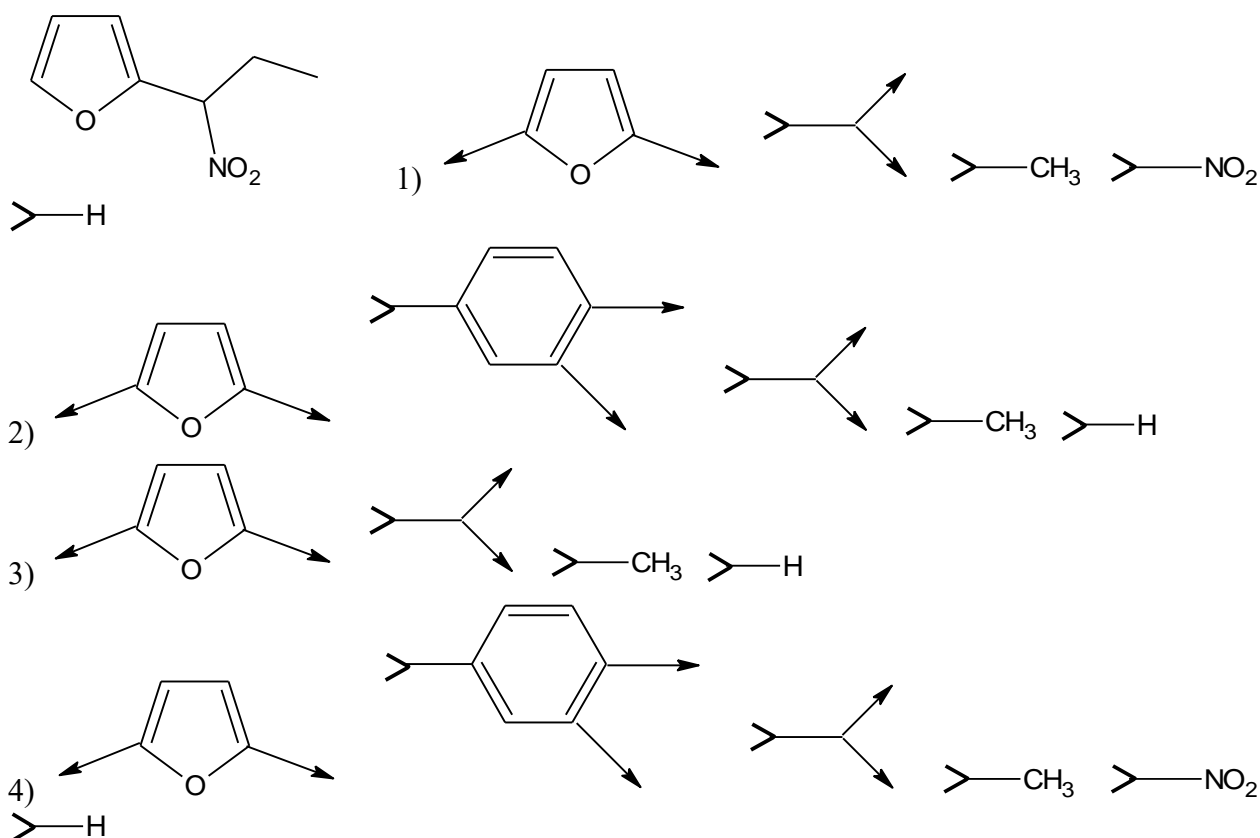
Контрольная работа № 3:

Вариант 18

1. Анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.
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 электростатического взаимодействия разноименных зарядов? Ответ обоснуйте.



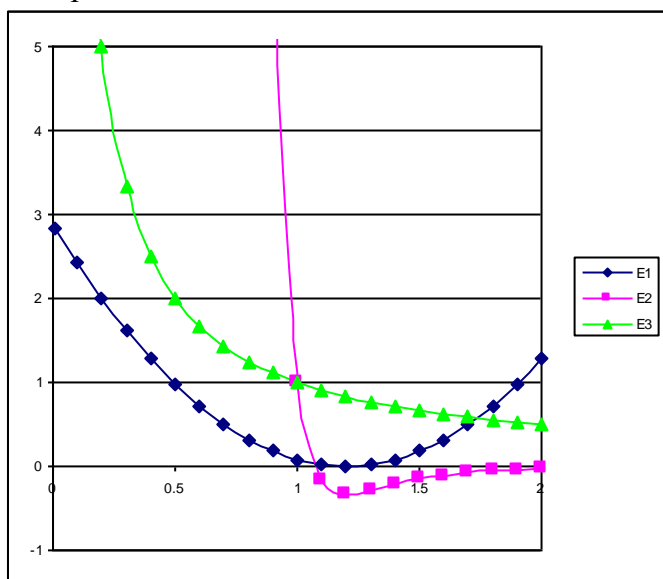
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.
VVTLAW---GRLVPGATYLS
V-TAAWHVKGR LSPGASYLS
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?



Контрольная работа № 3:

Вариант 19

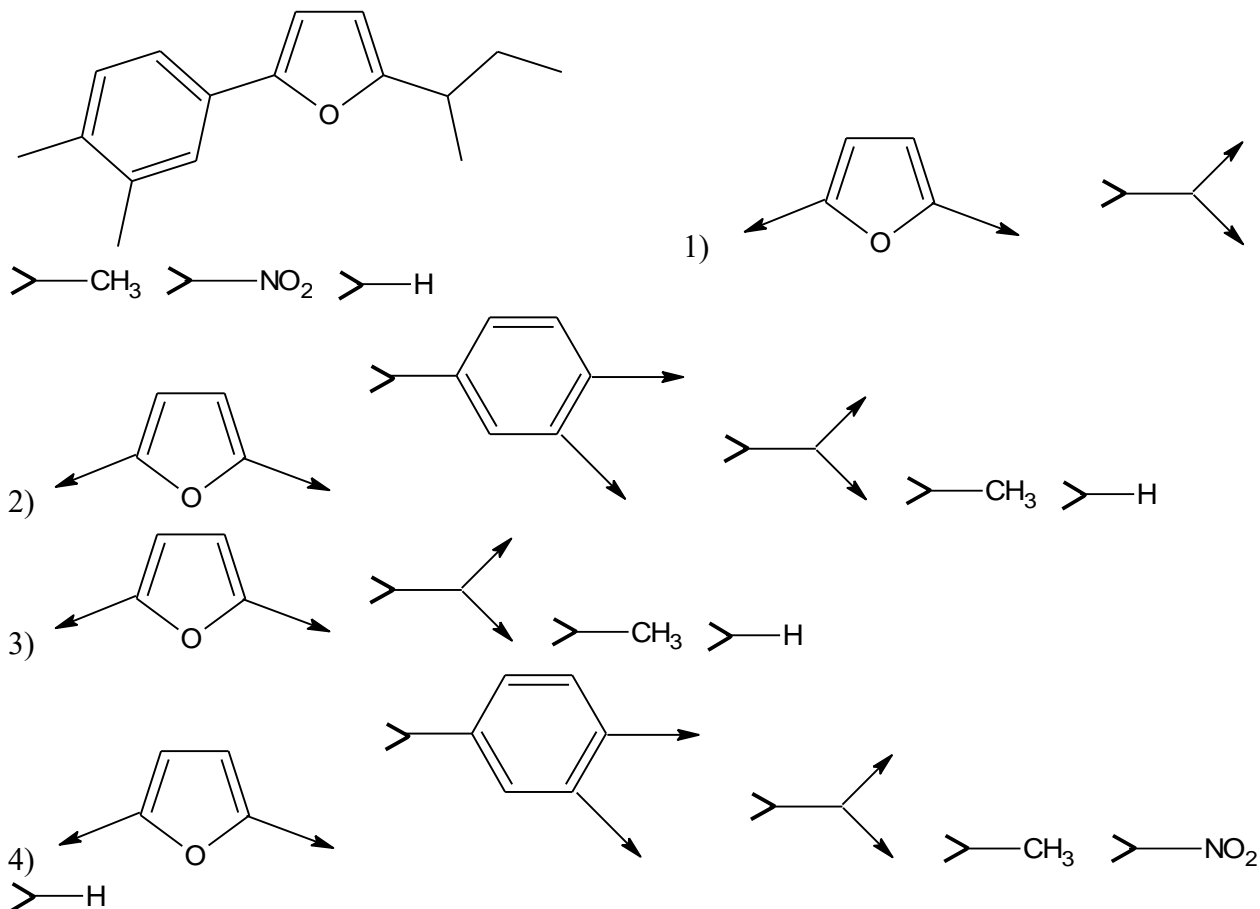
1. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные центры, учет формы молекул.
2. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия одноименных зарядов? Ответ обоснуйте.



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

VVT--WHVKGRLVPGATYLS
 VGTLAWPVKG---PGATYLT

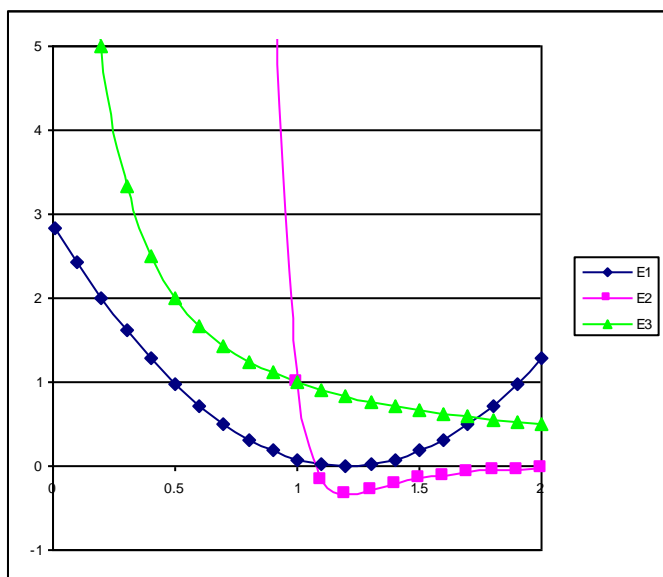
5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет сгенерировать указанную структуру?



Контрольная работа № 3:

Вариант 20

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

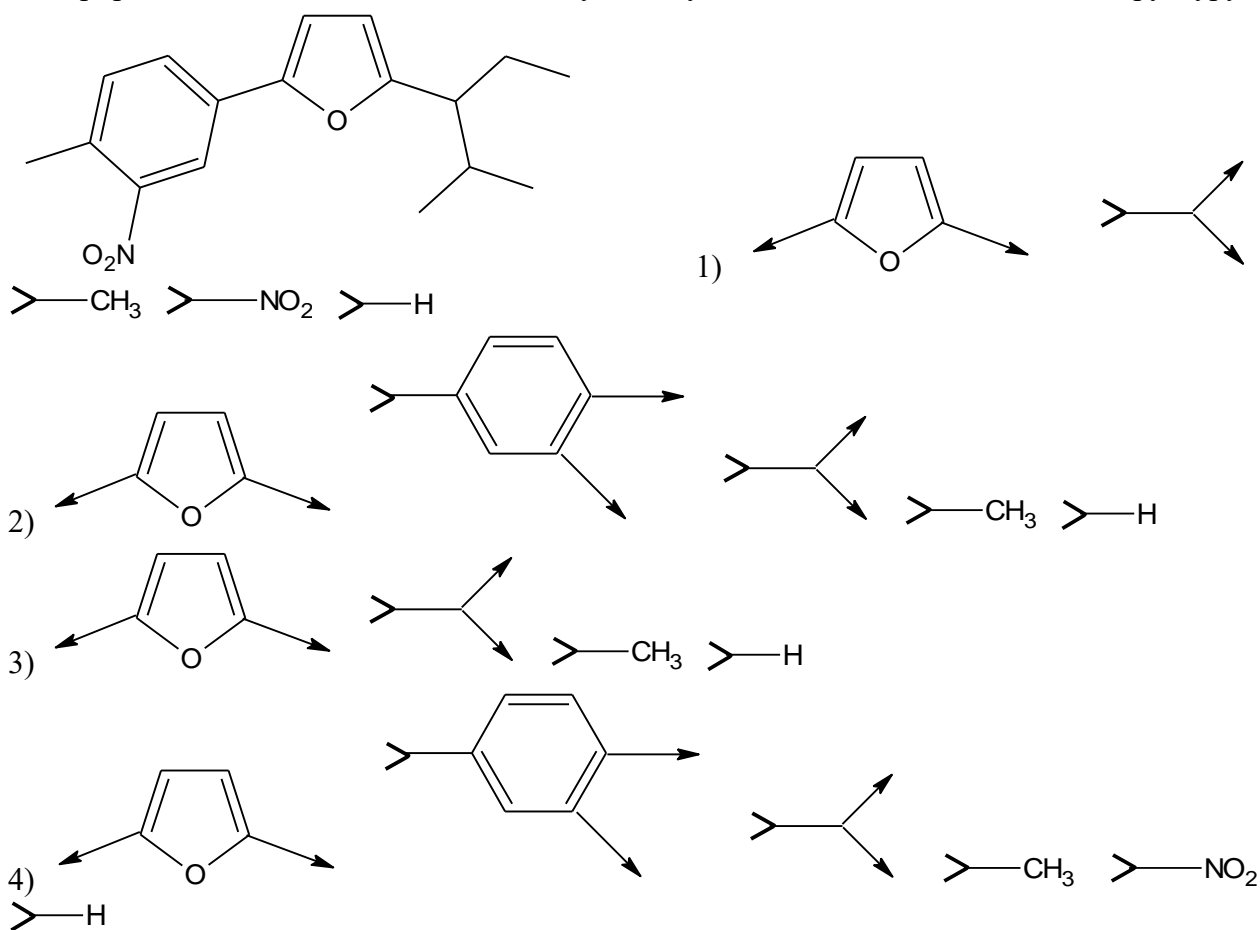


4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания.

VVTLAWHVKGRLVP--TYLS

VVTLIWH--GRLIPGATSLS

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



Расчетно-графическая работа:

Вариант 1

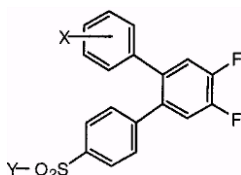
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения

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? Попробуйте 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;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 2

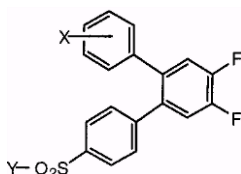
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

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-Cl-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;

Расчетно-графическая работа:

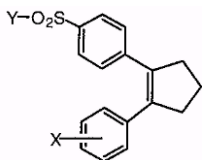
Вариант 3

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

no.	X	Y	log 1/C	σ_x^+	MVol	L _{X,3}
1	4-F	Me	7.59	-0.07	2.32	2.06
2	3,4-F ₂	NH ₂	7.75	0.27	2.29	2.65
3	3-Cl-4-F	Me	7.52	0.30	2.44	3.52
4	3,4,5-F ₃	NH ₂	5.54	0.61	2.31	2.65
5	4-OMe	Me	8.30	-0.78	2.50	2.06
6	4-OMe	NH ₂	8.70	-0.78	2.46	2.06
7	3-F-4-OMe	Me	6.92	-0.44	2.52	2.65
8	3-F-4-OMe	NH ₂	7.80	-0.44	2.48	2.65
9	3-Cl-4-OMe	Me	6.85	-0.41	2.62	3.52
10	3-Cl-4-OMe	NH ₂	8.05	-0.41	2.58	3.52
11	4-NMe ₂	Me	8.30	-1.33	2.80	3.52
12	3-Cl-4-NMe ₂	NH ₂	8.70	-1.33	2.76	3.52

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса;

MVol – расчетное значение молекулярного объема;

L – параметр STERIMOL;

Расчетно-графическая работа:

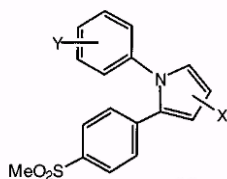
Вариант 4

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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2

N	X	Y	log 1/C	ClogP	MR _{X,4}	$\sigma_{Y,4}^+$
1	5-Me	4-F	7.22	4.28	0.10	-0.07

2	5-Me	H	7.22	4.10	0.10	0.00
3	5-Me	4-CF ₃	7.10	5.07	0.10	0.61
4	5-Me	4-Me	7.40	4.60	0.10	-0.31
5	5-Me	3,4-F ₂	6.60	4.37	0.10	0.27
6	H	4-F	4.99	3.79	0.10	-0.07
7	4-COCF ₃ -5-Me	4-F	6.92	4.42	1.12	-0.07
8	4-COMe-5-Me	4-F	5.79	3.86	1.12	-0.07
9	4-COC ₆ H ₅ -5-Me	4-F	5.99	5.46	3.03	-0.07
10	4-SO ₂ CF ₃ -5-Me	4-F	7.22	4.99	1.29	-0.07
11	4-CHO-5-Me	4-F	5.49	3.85	0.69	-0.07
12	4-CN-5-Me	4-F	6.13	3.94	0.63	-0.07

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса;

Расчетно-графическая работа:

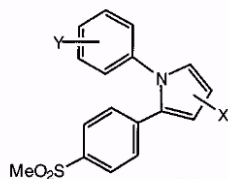
Вариант 5

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, Matlab, 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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2

N	X	Y	log 1/C	ClogP	MR _{X,4}	$\sigma^+_{Y,4}$
1	5-Me	4-F	7.22	4.28	0.10	-0.07
2	5-Me	H	7.22	4.10	0.10	0.00
3	5-Me	4-CF ₃	7.10	5.07	0.10	0.61
4	5-Me	4-Me	7.40	4.60	0.10	-0.31
5	5-Me	3,4-F ₂	6.60	4.37	0.10	0.27
6	4-CH ₂ NMe ₂ - 5-Me	4-F	4.00	4.07	1.87	-0.07
7	4-CH ₂ OCOMe- 5-Me	4-F	6.33	4.05	1.65	-0.07
8	4-CH ₂ OH-5-Me	4-F	5.41	3.20	0.72	-0.07

9	4-(CH ₂ O-4-Cl- C ₆ H ₄)-5-Me	4-F	7.52	6.77	3.68	-0.07
10	4-(CH ₂ O-3-Cl- C ₆ H ₄)-5-Me	4-F	7.10	6.77	3.68	-0.07
11	4-CH(OH)CF ₃ - 5-Me	4-F	5.84	4.26	1.13	-0.07
12	4-CH ₂ CF ₃ -5-Me	4-F	6.85	4.67	0.97	-0.07

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса;

Расчетно-графическая работа:

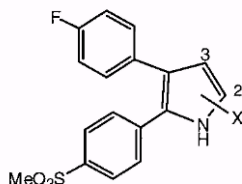
Вариант 6

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	log 1/C	σ_x	MVol	$E_{НОМО}$
1	H	4.90	0.00	2.23	-8.66
2	2-SCN	4.14	0.52	2.55	-9.01
3	2-SMe	4.46	0.00	2.54	-8.74
4	2-Br	4.40	0.23	2.41	-8.79
5	2-COCF ₃	3.53	0.80	2.58	-9.18
6	2-I	4.04	0.18	2.49	-8.81
7	2-SO ₂ Me	3.57	0.72	2.65	-9.16
8	2-Cl	4.38	0.23	2.36	-8.74
9	1-Me-2-Br	4.45	0.23	2.55	-8.73
10	2-CN	4.19	0.66	2.39	-8.99
11	2-NO ₂	4.20	0.78	2.41	-9.29
12	2,3-Cl ₂	4.16	0.60	2.48	-8.92

σ – константа Гаммета для заместителя;

MVol – расчетное значение молекулярного объема;

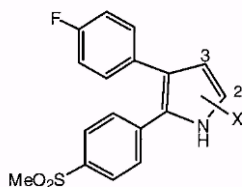
$E_{НОМО}$ – энергия высшей занятой молекулярной орбитали;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 7

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, Matlab, 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	log 1/C	σ_x	MVol	E_{HOMO}
1	2-I	4.04	0.18	2.49	-8.81
2	2-SO ₂ Me	3.57	0.72	2.65	-9.16
3	2-Cl	4.38	0.23	2.36	-8.74
4	1-Me-2-Br	4.45	0.23	2.55	-8.73
5	2-CN	4.19	0.66	2.39	-8.99
6	2-NO ₂	4.20	0.78	2.41	-9.29
7	2,3-Cl ₂	4.16	0.60	2.48	-8.92
8	2-Cl-3-Br	4.06	0.62	2.53	-9.04
9	1-COMe-2-Br	3.52	0.23	2.71	-8.92
10	1-Me-2,3-Br ₂	4.25	0.62	2.72	-9.01
11	1-Me-2,3-Cl ₂	4.60	0.60	2.62	-8.88
12	1-Me	4.70	0.00	2.37	-8.60

σ – константа Гаммета для заместителя;

MVol – расчетное значение молекулярного объема;

E_{HOMO} – энергия высшей занятой молекулярной орбитали;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 8

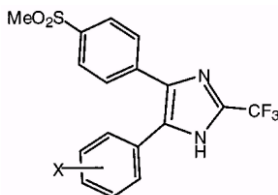
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

- 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	log 1/C	ClogP	MVol	Bl _{X,2}
1	2-Cl	5.89	3.56	2.49	1.80
2	3- Cl	7.10	3.81	2.49	1.00
3	4- Cl	6.43	3.81	2.49	1.00
4	2-CH ₃	5.75	3.29	2.51	1.52
5	3- CH ₃	6.22	3.59	2.51	1.00
6	4- CH ₃	6.19	3.59	2.51	1.00
7	4-OCH ₃	5.54	3.10	2.57	1.00
8	3,4-Cl ₂	7.40	4.40	2.61	1.00
9	2,4-F ₂	6.26	3.38	2.40	1.35
10	3,4-F ₂	6.80	3.31	2.40	1.00
11	3-Cl-4-CH ₃	6.64	4.24	2.63	1.00
12	2-CH ₃ -3-F	5.77	3.44	2.53	1.52

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MVol – расчетное значение молекулярного объема;

B₁ – параметр STERIMOL;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 9

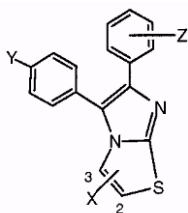
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

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

no.	X	Y	Z	log 1/C	CMR	B _{1Z,4}	B _{1Y}
1	H	SO ₂ Me	H	7.80	9.76	1.00	2.03
2	H	H	4-SMe	5.30	9.70	1.70	1.00
3	H	H	4-SO ₂ Me	5.49	9.76	2.03	1.00
4	H	SMe	H	6.38	9.70	1.00	1.70
5	2-Me	H	4-SO ₂ Me	6.85	10.23	2.03	1.00
6	H	SO ₂ Me	4-F	7.85	9.78	1.35	2.03
7	H	SO ₂ Me	3,4-F ₂	7.92	9.79	1.35	2.03
8	2-Me	SO ₂ Me	H	7.92	10.23	1.00	2.03
9	3-Me	SO ₂ Me	H	5.52	10.23	1.00	2.03
10	2,3-Me ₂	SO ₂ Me	H	5.30	10.69	1.00	2.03
11	2,3-Me ₂	H	4-SO ₂ Me	5.30	10.69	2.03	1.00
12	3-Me	H	4-SO ₂ Me	6.00	10.23	2.03	1.00

CMR – расчетное значение молекулярной рефракции;
B₁ – параметр STERIMOL;

Расчетно-графическая работа:

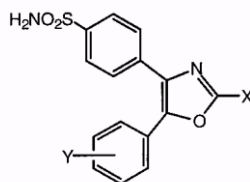
Вариант 10

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 1

N	X	Y	log 1/C	ClogP	B1 _X	L _{Y,3}
1	Me	H	4.00	2.03	1.52	2.06
2	Me	4-Cl	5.16	2.75	1.52	2.06
3	Me	4-Br	4.83	2.90	1.52	2.06
4	Me	3-F-4-OMe	4.10	2.07	1.52	2.65
5	CH ₂ OMe	4-Cl	4.82	2.26	1.52	2.06
6	CH ₂ OMe	4-Br	4.71	2.41	1.52	2.06
7	CF ₂ H	H	4.96	1.95	1.71	2.06
8	CF ₃	4-Cl	6.40	3.50	1.99	2.06
9	CF ₃	3,4-Cl ₂	5.46	4.09	1.99	3.52
10	CF ₃	3,4-F ₂	4.93	3.00	1.99	2.65
11	CF ₃	3-Cl-4-OMe	4.76	3.36	1.99	3.52
12	CF ₃	3-F-4-OMe	5.66	2.82	1.99	2.65

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

L, B₁ – параметры STERIMOL;

Расчетно-графическая работа:

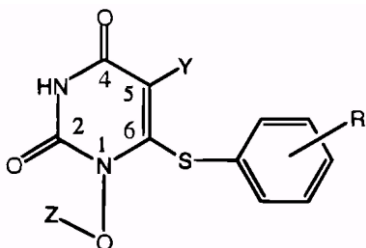
Вариант 11

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, Matlab, 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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B5 _Z	π _{R-3,5}
1	H	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.17	4.92	3.49	0.00

2	2-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	4.86	4.92	3.49	0.00
3	3-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	6.01	4.92	3.49	0.56
4	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
5	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
6	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
7	H	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	4.72	6.17	4.54	0.00
8	3-Me	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	5.33	6.17	4.54	0.56
9	3,5-di-Me	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	6.72	6.17	4.54	1.12
10	3,5-di-F	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	5.12	6.17	4.54	0.28
11	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₄ H ₉	6.38	6.17	4.54	1.12
12	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ C ₆ H ₅	5.07	4.62	6.02	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

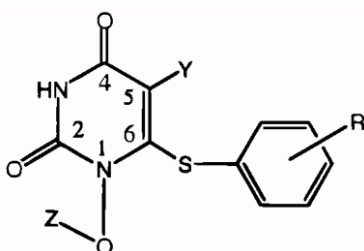
Вариант 12

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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B _{5Z}	π _{R-3,5}
1	H	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.17	4.92	3.49	0.00
2	2-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	4.86	4.92	3.49	0.00
3	3-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	6.01	4.92	3.49	0.56
4	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
5	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
6	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
7	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	6.31	8.33	3.58	1.12
8	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₄ -3-Me	6.08	8.33	4.49	1.12

9	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ OMe	6.37	5.55	4.49	1.12
10	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ OC ₆ H ₅	6.34	9.00	3.58	1.12
11	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	C ₃ H ₇	6.46	4.92	3.49	1.12
12	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	(CH ₂) ₃ OH	6.27	6.17	4.54	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

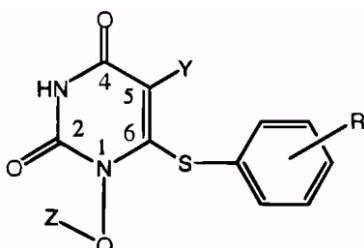
Вариант 13

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, Matlab, 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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B5 _Z	π _{R-3,5}
1	H	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.17	4.92	3.49	0.00
2	2-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	4.86	4.92	3.49	0.00
3	3-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	6.01	4.92	3.49	0.56
4	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
5	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
6	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
7	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	C ₄ H ₉	6.01	6.17	4.54	1.12
8	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₅	5.24	4.62	6.02	1.12
9	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	6.34	8.33	3.58	1.12
10	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	CH ₂ CH ₂ OMe	5.71	5.55	4.49	1.12
11	3,5-di-Me	^c C ₃ H ₅	C ₃ H ₇	5.21	4.92	3.49	1.12
12	3,5-di-Me	^c C ₃ H ₅	(CH ₂) ₃ OH	4.82	6.17	4.54	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

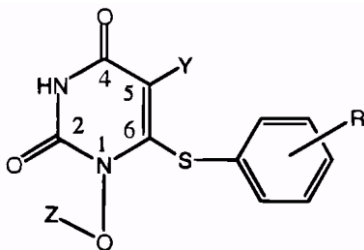
Вариант 14

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.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B5 _Z	π _{R-3,5}
1	H	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.17	4.92	3.49	0.00
2	2-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	4.86	4.92	3.49	0.00
3	3-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	6.01	4.92	3.49	0.56
4	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
5	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
6	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
7	3,5-di-Me	^c C ₃ H ₅	CH ₂ C ₆ H ₅	4.80	4.62	6.02	1.12
8	3,5-di-Me	^c C ₃ H ₅	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	5.22	8.33	3.58	1.12
9	3,5-di-Me	^c C ₃ H ₅	C ₃ H ₇	5.59	4.92	3.49	1.12
10	3,5-di-Me	C ₃ H ₇	(CH ₂) ₃ OH	5.09	6.17	4.54	1.12
11	3,5-di-Me	C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₅	4.99	4.62	6.02	1.12
12	3,5-di-Me	C ₃ H ₇	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	6.16	8.33	3.58	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 15

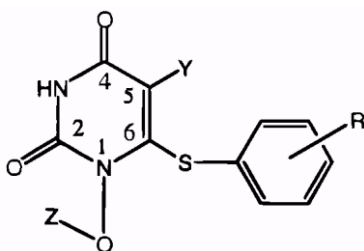
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



ЕС₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B5 _Z	π _{R-3,5}
1	H	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.17	4.92	3.49	0.00
2	2-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	4.86	4.92	3.49	0.00
3	3-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	6.01	4.92	3.49	0.56
4	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
5	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
6	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
7	3,5-di-Me	C ₃ H ₇	CH ₂ C ₆ H ₅	4.99	4.62	6.02	1.12
8	3,5-di-Me	C ₃ H ₇	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	6.16	8.33	3.58	1.12
9	3,5-di-Me	Me	C ₃ H ₇	6.03	4.92	3.49	1.12
10	3,5-di-Me	Me	(CH ₂) ₃ OH	5.26	6.17	4.54	1.12
11	3,5-di-Me	Me	CH ₂ C ₆ H ₅	5.00	4.62	6.02	1.12
12	3,5-di-Me	Me	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	5.51	8.33	3.58	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

Вариант 16

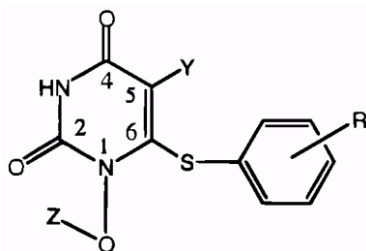
В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

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.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	Z	log 1/C	L _Z	B5 _Z	π _{R-3,5}
1	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₃ H ₇	7.19	4.92	3.49	1.12
2	3-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.72	4.92	3.49	0.14
3	3,5-di-F	CHMe ₂	C ₃ H ₇	5.62	4.92	3.49	0.28
4	H	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	4.72	6.17	4.54	0.00
5	3-Me	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	5.33	6.17	4.54	0.56
6	3,5-di-Me	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	6.72	6.17	4.54	1.12
7	3,5-di-F	CHMe ₂	(CH ₂) ₃ OH	5.12	6.17	4.54	0.28
8	3,5-di-Me	CHMe ₂	C ₄ H ₉	6.38	6.17	4.54	1.12
9	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ C ₆ H ₅	5.07	4.62	6.02	1.12
10	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	6.31	8.33	3.58	1.12
11	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₄ -3-Me	6.08	8.33	4.49	1.12
12	3,5-di-Me	CHMe ₂	CH ₂ CH ₂ OMe	6.37	5.55	4.49	1.12

L, B₅ – параметры STERIMOL;

π – липофильная константа заместителя;

Расчетно-графическая работа:

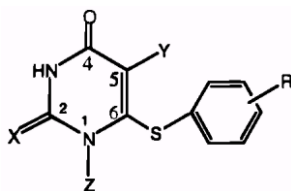
Вариант 17

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, Matlab, 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.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	X	Z	logI/C	B5 _{R,5}	ClogP	MR _Y
1	3,5-di-Me	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	6.59	2.04	2.37	0.57
2	3,5-di-Cl	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.89	1.80	2.80	0.57
3	3,5-di-Me	Me	S	OCH ₂ CH ₂ OH	6.66	2.04	2.56	0.57
4	3-CO ₂ Me	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.10	1.00	1.34	0.57
5	3-COMe	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.14	1.00	0.81	0.57
6	3-CN	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	0.80	0.57
7	H	CH ₂ CH=CH ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.60	1.00	1.94	1.45
8	H	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	6.96	1.00	2.09	1.03
9	H	C ₃ H ₇	S	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	2.62	1.50
10	H	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.23	1.00	2.49	1.50
11	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.11	2.04	3.09	1.03
12	3,5-di-Me	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.30	2.04	3.49	1.50

B₅ – параметр STERIMOL;

ClogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

Расчетно-графическая работа:

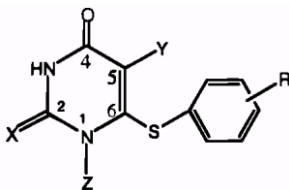
Вариант 18

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, Matlab, 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? Попробуйте предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	X	Z	logI/C	B5 _{R,5}	ClogP	MR _Y
1	H	CH ₂ CH=CH ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.60	1.00	1.94	1.45
2	H	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	6.96	1.00	2.09	1.03
3	H	C ₃ H ₇	S	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	2.62	1.50
4	H	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.23	1.00	2.49	1.50
5	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.11	2.04	3.09	1.03
6	3,5-di-Me	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.30	2.04	3.49	1.50
7	3,5-di-Cl	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.37	1.80	3.52	1.03
8	H	C ₂ H ₅	O	OCH ₂ CH ₂ OH	6.92	1.00	1.90	1.03

9	H	C ₃ H ₇	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.47	1.00	2.43	1.50
10	H	CHMe ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	7.20	1.00	2.30	1.50
11	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	O	OCH ₂ CH ₂ OH	7.89	2.04	2.90	1.03
12	3,5-di-Me	CHMe ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	8.57	2.04	3.30	1.50

B₅ – параметр STERIMOL;

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

Расчетно-графическая работа:

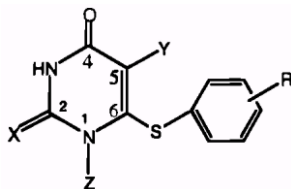
Вариант 19

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.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	X	Z	log1/C	B _{5R,5}	ClogP	MR _Y
1	3-CMe ₃	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	4.92	1.00	3.20	0.57
2	3-CF ₃	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	4.35	1.00	2.25	0.57
3	3-CO ₂ Me	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.10	1.00	1.34	0.57
4	3-COMe	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.14	1.00	0.81	0.57
5	3-CN	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	0.80	0.57
6	H	CH ₂ CH=CH ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.60	1.00	1.94	1.45
7	H	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	6.96	1.00	2.09	1.03
8	H	C ₃ H ₇	S	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	2.62	1.50
9	H	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.23	1.00	2.49	1.50
10	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.11	2.04	3.09	1.03
11	3,5-di-Me	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.30	2.04	3.49	1.50
12	3,5-di-Cl	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.37	1.80	3.52	1.03

B₅ – параметр STERIMOL;

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

Расчетно-графическая работа:

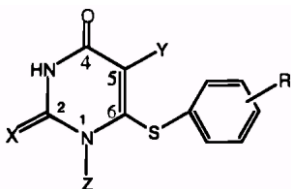
Вариант 20

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.



EC₅₀ – Анти-ВИЧ активность (ингибирование обратной транскриптазы ВИЧ)

N	R	Y	X	Z	logI/C	B _{5R,5}	ClogP	MR _Y
1	H	CH ₂ CH=CH ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	5.60	1.00	1.94	1.45
2	H	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	6.96	1.00	2.09	1.03
3	H	C ₃ H ₇	S	OCH ₂ CH ₂ OH	5.00	1.00	2.62	1.50
4	H	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.23	1.00	2.49	1.50
5	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.11	2.04	3.09	1.03
6	3,5-di-Me	CHMe ₂	S	OCH ₂ CH ₂ OH	8.30	2.04	3.49	1.50
7	3,5-di-Cl	C ₂ H ₅	S	OCH ₂ CH ₂ OH	7.37	1.80	3.52	1.03
8	H	CHMe ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	7.20	1.00	2.30	1.50
9	3,5-di-Me	C ₂ H ₅	O	OCH ₂ CH ₂ OH	7.89	2.04	2.90	1.03
10	3,5-di-Me	CHMe ₂	O	OCH ₂ CH ₂ OH	8.57	2.04	3.30	1.50
11	3,5-di-Cl	C ₂ H ₅	O	OCH ₂ CH ₂ OH	7.85	1.80	3.33	1.03
12	4-Me	Me	O	OCH ₂ CH ₂ OH	3.66	1.00	1.87	0.57

B₅ – параметр STERIMOL;

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео;

MR – расчетное значение молекулярной рефракции для заместителя;

3.2.2.1 Задания (вопросы) для оценки сформированности компетенций и индикаторов их достижения

Задания закрытого типа:

ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.

1. Какие методы машинного обучения позволяют строить карты активности?
 - ☐ а) Искусственные нейронные сети
 - ☐ б) Линейный дискриминантный анализ
 - ☒ **в) Регрессия частичных наименьших квадратов**
 - ☐ г) Кластерный анализ
2. Что представляет собой область применимости модели?
 - ☐ а) Диапазон значений дескрипторов для обучающей выборки
 - ☒ **б) Область химического пространства, где модель обеспечивает приемлемую точность прогноза**
 - ☐ в) Физически возможный диапазон значений активности
 - ☐ г) Набор структурных классов соединений обучающей выборки
3. Какие дескрипторы относятся к стерическим?
 - ☐ а) Липофильная константа заместителя
 - ☒ **б) Длина молекулы**
 - ☐ в) Индекс молекулярной связности
 - ☐ г) Средний заряд на атомах углерода
4. Какие особенности структуры отражают топологические дескрипторы?
 - ☐ а) Предпочтительность неполярного окружения молекулы
 - ☐ б) Расположение атомов в пространстве
 - ☐ в) Распределение электронной плотности в молекуле
 - ☒ **г) Атомы и связи между ними**
5. Какие фильтры можно использовать в ходе виртуального скрининга?
 - ☐ а) Фармакофорные модели
 - ☐ б) Условия подобия лекарствам
 - ☐ в) Молекулярный докинг
 - ☒ **г) Все вышеперечисленные**
6. Какими характеристиками должна обладать оптимальная модель связи структура–активность?
 - ☐ а) Высокая точность прогноза
 - ☐ б) Широкая область применимости
 - ☐ в) Возможность интерпретации с точки зрения механизма действия и структурных требований
 - ☒ **г) Все вышеперечисленное**
7. На какие параметры опирается прогнозирование активности в методе Фри-Уилсона?
 - ☐ а) Значения константы Гаммета для заместителей
 - ☒ **б) Вклады заместителей в активность**
 - ☐ в) Липофильность соединений

- г) Значения индексов Рандича
8. Что отражает порядок индексов молекулярной связности?
- а) Число атомов во фрагментах, по которым производится суммирование
 - **б) Число связей во фрагментах, по которым производится суммирование**
 - в) Максимальное допустимое значение степени вершины
 - г) Максимальное расстояние между атомами в молекуле
9. Какой подход к расчету эффективных зарядов на атомах наиболее подходит для целей анализа связи структура–активность?
- **а) Выравнивание электроотрицательностей**
 - б) Анализ топологии распределения электронной плотности в пространстве
 - в) Анализ заселенностей орбиталей
 - г) Использование формальных зарядов
10. В чем опасность случайных корреляций?
- а) Необходимость в длительных и сложных расчетах
 - б) Зависимость прогнозируемых значений от способа расчета дескрипторов
 - **в) Значительные ошибки прогнозов при высоких оценках параметров качества модели**
 - г) Сложность интерпретации зависимости структура–активность
11. Какой параметр характеризует долю вариации зависимой переменной, объясненную регрессионной моделью?
- а) Коэффициент Стьюдента
 - **б) Коэффициент детерминации (R^2)**
 - в) Стандартное отклонение
 - г) Индекс Рандича
12. Что такое «выброс» (outlier) в контексте анализа химических данных?
- а) Вещество с высокой летучестью
 - **б) Объект, значения параметров которого существенно отклоняются от основной выборки**
 - в) Ошибка при вводе названия соединения
 - г) Молекула с максимальной молекулярной массой
13. Нормализация данных перед построением модели необходима для:
- а) Ускорения работы процессора
 - **б) Приведения дескрипторов с разными единицами измерения к единому масштабу**
 - в) Удаления токсичных соединений из базы
 - г) Визуализации 3D-структур
14. Метод наименьших квадратов (МНК) в хемоинформатике используется для:
- а) Рисования химических структур
 - **б) Минимизации суммы квадратов отклонений расчетных значений от экспериментальных**
 - в) Измерения температуры кипения
 - г) Определения pH среды

15. **Что показывает коэффициент корреляции Пирсона (r)?**
- а) Нелинейную зависимость между дескрипторами
 - б) **Степень линейной зависимости между двумя переменными**
 - в) Число атомов в молекуле
 - г) Стабильность конформации
16. **Какое значение p-value (уровень значимости) традиционно считается пороговым для подтверждения статистической значимости результата?**
- а) 0.5
 - б) **0.05**
 - в) 1.0
 - г) 0.95
17. **Для чего используется критерий Фишера (F) в отчетах по QSAR?**
- а) Для определения цвета вещества
 - б) **Для оценки статистической значимости уравнения регрессии в целом**
 - в) Для расчета заряда на атоме
 - г) Для классификации по липофильности
18. **Среднеквадратичная ошибка (RMSE) измеряется:**
- а) В процентах
 - б) **В тех же единицах, что и целевая величина (например, pIC50)**
 - в) В безразмерных единицах от 0 до 1
 - г) В градусах Кельвина
19. **Мультиколлинеарность — это:**
- а) Высокая реакционная способность
 - б) **Наличие сильной линейной зависимости между независимыми переменными (дескрипторами)**
 - в) Ошибка при расчете молекулярной массы
 - г) Способность вещества растворяться в воде
20. **Какая величина характеризует среднюю абсолютную ошибку предсказания?**
- а) R^2
 - б) **MAE**
 - в) $\log P$
 - г) Q^2
21. **Метод перекрестной проверки «Leave-one-out» (LOO) предназначен для:**
- а) Удаления одного лишнего атома
 - б) **Оценки внутренней устойчивости модели**
 - в) Поиска дубликатов в базе данных
 - г) Написания аннотации к отчету
22. **Относительная ошибка эксперимента рассчитывается как:**
- а) Сумма всех значений
 - б) **Отношение абсолютной ошибки к истинному значению (в %)**
 - в) Квадрат стандартного отклонения
 - г) Разность между максимумом и минимумом

23. **Что такое доверительный интервал?**
○ а) Срок годности модели
○ б) **Диапазон, в котором с заданной вероятностью находится истинное значение**
○ в) Расстояние между молекулами в кристалле
○ г) Уровень доверия к автору отчета
24. **Стандартная ошибка коэффициента регрессии указывает на:**
○ а) Общую точность модели
○ б) **Точность определения вклада конкретного дескриптора в активность**
○ в) Количество дескрипторов в уравнении
○ г) Время расчета модели
25. **При визуальном анализе остатков (residuals) их случайное распределение вокруг нуля говорит о:**
○ а) Плохом качестве данных
○ б) **Адекватности выбранной модели**
○ в) Необходимости смены программного обеспечения
○ г) Наличии системной ошибки
26. **Какой тип графика наиболее эффективен для демонстрации качества QSAR-модели?**
○ а) Круговая диаграмма
○ б) **График зависимости «Расчет vs Эксперимент» (Scatter plot)**
○ в) Гистограмма распределения элементов
○ г) Диаграмма Ганта
27. **Матрица неточностей (Confusion Matrix) используется в задачах:**
○ а) Регрессии
○ б) **Классификации (например, токсичен / не токсичен)**
○ в) Визуализации 3D-поверхностей
○ г) Форматирования текста отчета
28. **Что означает аббревиатура AUC в анализе результатов классификации?**
○ а) Автоматическое управление кодом
○ б) **Площадь под ROC-кривой**
○ в) Активность универсального соединения
○ г) Угол между связями
29. **Для визуализации структуры химического пространства большой библиотеки веществ часто используют:**
○ а) Таблицы Excel
○ б) **Метод главных компонент (PCA) или t-SNE**
○ в) Спектры ЯМР
○ г) Линейные списки имен IUPAC
30. **ROC-кривая строится в координатах:**
○ а) Давление — Температура
○ б) **Доля ложноположительных — Доля истинно положительных ответов**
○ в) Концентрация — Время

- г) Масса — Активность
31. В научно-техническом отчете подписи к рисункам обычно располагаются:
- а) Сбоку от рисунка
 - б) **Снизу под рисунком**
 - в) Над рисунком
 - г) В отдельном приложении в конце документа
32. В каком разделе отчета приводится интерпретация физико-химического смысла полученной модели?
- а) Введение
 - б) **Обсуждение результатов**
 - в) Список литературы
 - г) Оглавление
33. Что такое тепловая карта (Heatmap) в анализе биологической активности?
- а) Карта пожарной безопасности лаборатории
 - б) **Цветовое представление матрицы активности соединений против набора мишеней**
 - в) Схема распределения температуры в реакторе
 - г) График плавления вещества
34. При оформлении таблиц в научном отчете единицы измерения величин указываются:
- а) В каждом поле таблицы
 - б) **В заголовке столбца или строки**
 - в) Только в выводах
 - г) Не указываются вообще
35. Для чего используется дендрограмма в анализе результатов?
- а) Для описания биосинтеза в растениях
 - б) **Для визуализации иерархической кластеризации данных**
 - в) Для расчета энергии связей
 - г) Для проверки орфографии в отчете
36. Какая метрика используется для оценки сходства двух молекул при анализе результатов поиска?
- а) Коэффициент вязкости
 - б) **Коэффициент Танимото**
 - в) Постоянная Больцмана
 - г) Число Авогадро
37. Что такое «область применимости» (Applicability Domain), представляемая в отчете?
- а) Список стран, где разрешено лекарство
 - б) **Химическое пространство, в котором предсказания модели достоверны**
 - в) Температурный режим работы сервера
 - г) Перечень лабораторий-партнеров

38. **В научно-техническом отчете обязательным является наличие:**
- а) Рецензии от студента
 - б) **Аннотации и списка ключевых слов**
 - в) Биографии авторов
 - г) Рекламных вставок ПО
39. **Использование формата SMILES в отчетах удобно для:**
- а) Описания цвета раствора
 - б) **Компактного представления структуры молекулы в виде текста**
 - в) Оценки стоимости реактивов
 - г) Измерения давления
40. **Как называется процедура проверки модели на случайные корреляции путем перемешивания значений активности?**
- а) Виртуальный скрининг
 - б) **Y-рандомизация (Y-scrambling)**
 - в) Молекулярная динамика
 - г) Кристаллизация
41. **Что такое внутренняя валидация модели?**
- а) Проверка орфографии сотрудником отдела
 - б) **Оценка качества модели на основе данных обучающей выборки (например, кросс-валидация)**
 - в) Сравнение результатов с данными из интернета
 - г) Очистка базы от примесей
42. **Что такое внешняя валидация?**
- а) Оценка работы экспертами из другого вуза
 - б) **Проверка предсказательной способности модели на независимой тестовой выборке**
 - в) Расчет параметров на другом компьютере
 - г) Публикация результатов в зарубежном журнале
43. **Параметр Q^2_{ext} (или R^2_{pred}) характеризует:**
- а) Качество описания обучающей выборки
 - б) **Точность предсказания для внешней тестовой выборки**
 - в) Заряд ядра атома
 - г) Количество публикаций по теме
44. **Переобучение (overfitting) — это ситуация, когда:**
- а) Исследователь работал слишком долго
 - б) **Модель отлично описывает обучающие данные, но не способна предсказывать новые**
 - в) Компьютер перегрелся при расчетах
 - г) Число дескрипторов равно единице
45. **В разделе «Методы» научно-технического отчета обязательно указывается:**
- а) Обед сотрудников
 - б) **Используемое программное обеспечение и версии алгоритмов**
 - в) Цвет интерфейса программы
 - г) Марка монитора

46. Для чего в хемоинформатике используется процедура «curation» (курация) данных?
- а) Для назначения куратора группы
 - б) Для очистки и стандартизации данных перед анализом (удаление солей, проверка структур)
 - в) Для хранения реактивов
 - г) Для печати дипломов
47. Что такое дескрипторы Кира-Холла?
- а) Тип химической посуды
 - б) Топологические индексы связности, описывающие структуру молекулы
 - в) Фамилии авторов учебника
 - г) Единицы измерения активности
48. Какая величина используется для оценки надежности отдельных коэффициентов в линейном уравнении?
- а) Индекс Винера
 - б) t-статистика Стьюдента
 - в) Молекулярный вес
 - г) Скорость света
49. Что означает «воспроизводимость» эксперимента в хемоинформатике?
- а) Возможность скопировать файл
 - б) Возможность получить тот же результат при тех же исходных данных и методах
 - в) Громкость звука при работе программы
 - г) Количество созданных копий отчета
50. При подготовке отчета список литературы оформляется согласно:
- а) Личным предпочтениям автора
 - б) Требованиям ГОСТ или конкретного научного издания
 - в) Алфавиту имен главных героев
 - г) Дате прочтения статьи
51. Для чего используется кросс-валидация «Leave-Many-Out» (LMO)?
- а) Для удаления многих атомов из молекулы
 - б) Для более жесткой проверки устойчивости модели путем удаления групп объектов
 - в) Для сокращения объема отчета
 - г) Для ускорения синтеза
52. Что такое ложноположительный результат (False Positive)?
- а) Ошибка в знаке числа
 - б) Когда неактивное вещество ошибочно предсказано моделью как активное
 - в) Когда компьютер выдает ошибку доступа
 - г) Хорошее настроение исследователя

53. В чем заключается смысл «Правила пяти» Липински в анализе результатов скрининга?
- а) Отчет должен быть на 5 страницах
 - б) Критерии для оценки вероятности пероральной всасываемости лекарства
 - в) Пять стадий проверки данных
 - г) Использование пяти компьютеров для расчета
54. Что такое скрининг (screening) в контексте обработки результатов?
- а) Создание снимка экрана
 - б) Процесс массового тестирования (виртуального или реального) соединений на активность
 - в) Очистка экрана монитора
 - г) Проверка на плагиат
55. Информативность дескриптора в модели определяется:
- а) Его длиной
 - б) Его вкладом в объяснение дисперсии зависимой переменной
 - в) Алфавитным порядком
 - г) Тем, насколько легко его рассчитать
56. Какое расширение файлов наиболее часто используется для хранения 3D-результатов докинга в отчетах?
- а) .txt
 - б) .pdb или .sdf
 - в) .mp3
 - г) .exe
57. Целью этапа «Data Mining» в хемоинформатике является:
- а) Добыча полезных ископаемых
 - б) Поиск скрытых закономерностей в больших массивах данных
 - в) Ремонт жесткого диска
 - г) Написание кода на языке C++
58. Что такое «протокол расчета», представляемый в научно-техническом отчете?
- а) Список нарушений дисциплины
 - б) Последовательная запись всех этапов обработки данных и параметров моделирования
 - в) Текст выступления на конференции
 - г) Инструкция к прибору
59. Какая метрика (метрика расстояния) чаще всего используется для оценки близости объектов в пространстве дескрипторов?
- а) Километры
 - б) Евклидово расстояние
 - в) Световые годы
 - г) Граммы на моль
60. Основным результатом выполнения работы по хемоинформатике является:
- а) Получение нового вещества в колбе

- **б) Построенная и валидированная модель с оценкой её надежности и области применения**
- в) Установка новой операционной системы
- г) Сдача пустого бланка отчета

ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.

1. Как можно увеличить липофильность соединения для повышения активности?
 - а) Ввести полярные или заряженные заместители
 - б) Восстановить ароматическое кольцо до насыщенного
 - в) Замкнуть два заместителя в циклическую систему
 - **г) Ввести неполярные заместители**
2. Какие взаимодействия стабилизируют вторичную структуру белков?
 - а) Дисульфидные связи между остатками цистеина
 - **б) Водородные связи между группами СО и NH в амидных связях**
 - в) Гидрофобные взаимодействия ароматических аминокислот
 - г) Электростатические взаимодействия между ионизированными амино- и карбокси- группами
3. Какие процессы в основном определяют влияние липофильности соединения на биоактивность?
 - а) Растворение вещества в воде
 - б) Активный транспорт вещества с помощью специфических насосов или транспортеров
 - в) Связывание вещества с белками плазмы крови
 - **г) Пассивный транспорт вещества через мембраны и другие биологические барьеры**
4. Как учитываются отклонения от аддитивности в методе расчета липофильности по Реккеру?
 - а) Аддитивность обеспечивается благодаря использованию разных вкладов для разных типов атомов
 - **б) В определенных ситуациях к итоговому значению добавляются поправки, обычно выраженные как целое число магических констант**
 - в) Модель обеспечивает приемлемую точность даже без учета отклонений от аддитивности
 - г) Значения поправок для каждого типа структур приводятся в таблице
5. Вероятность каких проблем при разработке лекарства уменьшается при соблюдении условий подобия лекарствам?
 - а) Плохие фармакокинетические свойства (биодоступность) вещества
 - б) Сложность синтеза и выделения соединения
 - в) Низкая селективность из-за большого числа способных к взаимодействиям групп
 - **г) Все вышеперечисленное**
6. В чем особенности моделирования структуры белков?
 - а) Благодаря современным экспериментальным методам можно получить структуру любого белка, что делает моделирование излишним

- **б) Большое число степеней свободы и возможных конформаций делает невозможной прямую оптимизацию структуры**
- в) Благодаря ограниченному числу аминокислот в линейной полипептидной цепи ее конформацию легко предсказать
- г) Точность моделирования структуры не зависит от конкретной последовательности

7. Каков характер зависимости активности от липофильности соединений?

- а) Параболическая зависимость с минимумом
- **б) Параболическая зависимость с максимумом**
- в) Линейная возрастающая зависимость
- г) Линейная убывающая зависимость

8. Какие процессы в основном определяют влияние липофильности соединения на биологическую активность?

- а) Растворение вещества в воде
- б) Активный транспорт вещества с помощью специфических насосов или транспортеров
- в) Связывание вещества с белками плазмы крови
- **г) Пассивный транспорт вещества через мембраны и другие биологические барьеры**

9. Какой метод не позволяет надежно определить структуру мишени для анализа ее взаимодействия с лигандами?

- **а) Прямое моделирование сворачивания полипептидной цепи**
- б) Моделирование по гомологии на основе экспериментальных структур белков со сходной последовательностью
- в) Рентгеноструктурный анализ комплекса белка с лигандом
- г) Исследование структуры белка в растворе методом ЯМР

10. Что затрудняет широкое применение методологии «обратной задачи в QSAR» для дизайна новых активных соединений?

- а) Дискретность значений дескрипторов не позволяет построить структуру с заданными свойствами
- б) Недостаточная точность моделей приводит к ошибкам при прогнозировании
- в) Число возможных структур и трудоемкость расчетов быстро возрастают из-за комбинаторного взрыва
- **г) Необходим индивидуальный учет структуры модели и дескрипторов для каждой конкретной задачи**

11. Какова основная задача виртуального скрининга в НИР?

- а) Синтез максимально возможного количества веществ
- **б) Отбор наиболее перспективных структур из цифровых библиотек для экспериментального тестирования**
- в) Определение рыночной стоимости лекарства
- г) Очистка лабораторной посуды

12. Какой метод поиска в базах данных используется, если известна структура активного природного лиганда, но неизвестна структура рецептора?

- а) Докинг
- **б) Поиск по химическому сходству (Similarity search)**

- в) Рентгеноструктурный анализ
 - г) Молекулярная динамика белка
13. **Лигандо-ориентированный дизайн (Ligand-based design) применяется, когда:**
- а) Известна 3D-структура белка-мишени
 - б) Известна структура одного или нескольких активных соединений, но нет данных о мишени
 - в) Нет данных ни о соединениях, ни о мишени
 - г) Нужно рассчитать только растворимость
14. **Метод «High-Throughput Screening» (ВТП) отличается от виртуального скрининга тем, что:**
- а) Он проводится на компьютере
 - б) Это реальный биологический эксперимент с использованием робототехники
 - в) Он дешевле виртуального
 - г) Он не требует наличия веществ
15. **Что такое «библиотека фокусированная» (focused library) в задачах НИД?**
- а) Набор случайных молекул
 - б) Набор соединений, отобранных по признаку вероятного взаимодействия с конкретной мишенью
 - в) Список книг в библиотеке университета
 - г) База данных всех известных в мире веществ
16. **Использование «структурных фильтров» (например, фильтр токсичных групп) при скрининге нужно для:**
- а) Усложнения работы
 - б) Исключения заведомо реакционноспособных или токсичных молекул на раннем этапе
 - в) Увеличения числа соединений в базе
 - г) Расчета цвета молекулы
17. **Для чего в хемоинформатике используется база данных ZINC?**
- а) Для изучения свойств цинка
 - б) Для получения структур коммерчески доступных соединений для виртуального скрининга
 - в) Для хранения личных данных исследователей
 - г) Для прогноза погоды
18. **Какая метрика наиболее популярна для оценки сходства при скрининге по дескрипторам (fingerprints)?**
- а) Расстояние Махаланобиса
 - б) Коэффициент Танимото
 - в) Число связей C-C
 - г) Плотность вещества
19. **Что такое «ложное срабатывание» (False Positive) при скрининге?**
- а) Компьютер выключился во время расчета
 - б) Модель предсказала активность, но эксперимент её не подтвердил

- в) Вещество взорвалось в пробирке
 - г) Модель не нашла ни одного соединения
20. **Поиск по фармакофору (Pharmacophore searching) основан на:**
- а) Только на топологии 2D-графа
 - б) **Расположении ключевых функциональных групп в 3D-пространстве**
 - в) Молекулярном весе
 - г) Названии фирмы-производителя
21. **Программа для рисования химических структур (например, ChemDraw) в НИД необходима для:**
- а) Печати этикеток
 - б) **Подготовки структурных данных для ввода в расчетные алгоритмы**
 - в) Замены микроскопа
 - г) Создания анимаций
22. **Что такое ADMET-профилирование?**
- а) Расчет энергии взрыва
 - б) **Прогноз всасывания, распределения, метаболизма, выведения и токсичности**
 - в) Определение чистоты реактива
 - г) Изучение истории создания лекарства
23. **Для решения задачи поиска новых ингибиторов фермента «с нуля» используется подход:**
- а) Репликация
 - б) **De novo дизайн**
 - в) Простое взвешивание
 - г) Титрование
24. **Какой формат файлов (.sdf, .mol, .pdb) содержит информацию о 3D-координатах атомов?**
- а) Только .txt
 - б) **Все перечисленные (.sdf, .mol, .pdb)**
 - в) Ни один из них
 - г) Только .jpg
25. **Что такое «Hit» (хит) в исследовательском процессе?**
- а) Популярная статья
 - б) **Соединение, показавшее активность в первичном скрининге**
 - в) Ошибка в программе
 - г) Стеклянная палочка
26. **Какая цель стоит перед исследователем при проведении молекулярного докинга?**
- а) Измерить массу белка
 - б) **Предсказать ориентацию лиганда в активном центре и оценить энергию связывания**
 - в) Рассчитать скорость испарения растворителя
 - г) Назвать белок по IUPAC

27. В докинге «Scoring function» (оценочная функция) служит для:
- а) Подсчета количества атомов
 - б) Ранжирования конформаций лиганда по их термодинамической выгодыности
 - в) Определения времени расчета
 - г) Проверки орфографии
28. Что такое «активный центр» (binding site) мишени?
- а) Геометрический центр белка
 - б) Полость или участок на поверхности макромолекулы, где происходит связывание с лигандом
 - в) Лаборатория, где проводится опыт
 - г) Место хранения файла
29. Для подготовки структуры белка к докингу (в рамках НИД) обязательно нужно:
- а) Удалить все атомы углерода
 - б) Добавить атомы водорода и удалить «лишние» молекулы воды (если это оправдано)
 - в) Покрасить модель в красный цвет
 - г) Изменить аминокислотную последовательность
30. Докинг с учетом гибкости белка (Flexible docking) нужен для:
- а) Ускорения расчетов
 - б) Учета изменений конформации мишени при связывании с лигандом
 - в) Экономии памяти компьютера
 - г) Работы с маленькими молекулами
31. Что такое «RMSD» при анализе результатов докинга?
- а) Радиальный момент силы
 - б) Среднеквадратичное отклонение координат атомов (мера сходства поз)
 - в) Скорость движения молекулы
 - г) Масса растворителя
32. Если структура белка неизвестна экспериментально, её можно построить методом:
- а) Регрессионного анализа
 - б) Гомологичного моделирования (Homology modeling)
 - в) Кристаллизации in silico
 - г) Экстракции
33. Энергия связывания в идеальном случае должна быть:
- а) Положительной и большой
 - б) Отрицательной (чем меньше значение, тем прочнее связь)
 - в) Равной нулю
 - г) Бесконечно большой
34. Для визуализации водородных связей между лекарством и белком используют:
- а) Текстовый редактор
 - б) Молекулярные вьюеры (PyMOL, VMD, Chimera)

- в) Калькулятор
 - г) Таблицы Менделеева
35. **Что моделирует метод молекулярной динамики (MD) в отличие от докинга?**
- а) Цену синтеза
 - б) **Поведение системы лиганд-рецептор во времени с учетом тепловых колебаний**
 - в) Статическую картинку связи
 - г) Только массу молекулы
36. **Взаимодействие «π-π стекинг» обычно возникает между:**
- а) Ионами металлов
 - б) **Ароматическими кольцами лиганда и аминокислот (например, фенилаланина)**
 - в) Двумя молекулами воды
 - г) Группами -CH₃
37. **Проверка «Redocking» (ре-докинг) проводится для:**
- а) Синтеза вещества заново
 - б) **Оценки способности программы воспроизвести экспериментальную позу кристаллизованного лиганда**
 - в) Удаления вирусов
 - г) Изменения pH
38. **Что такое «Hot spots» в структуре мишени?**
- а) Места перегрева сервера
 - б) **Ключевые аминокислотные остатки, вносящие основной вклад в энергию связывания**
 - в) Случайные атомы
 - г) Участки с высокой радиоактивностью
39. **Для чего в НИД используют «consensus scoring»?**
- а) Для голосования сотрудников
 - б) **Использования нескольких оценочных функций одновременно для повышения точности**
 - в) Сокращения числа авторов
 - г) Объединения всех файлов в один архив
40. **В каком формате обычно скачивают структуры белков из базы PDB (Protein Data Bank)?**
- а) .exe
 - б) **.pdb**
 - в) .mp4
 - г) .docx
41. **Ковалентный докинг применяется для:**
- а) Изучения слабых ван-дер-ваальсовых сил
 - б) **Моделирования ингибиторов, образующих прочную химическую связь с мишенью**
 - в) Расчета растворимости в спирте
 - г) Визуализации газов

42. **Что такое «Lead optimization» (оптимизация лида)?**
- а) Увольнение лидера группы
 - б) Улучшение свойств найденного активного вещества путем модификации его структуры
 - в) Смена операционной системы
 - г) Увеличение шрифта в отчете
43. **Использование «фантомных» атомов (dummy atoms) в моделировании нужно для:**
- а) Запутывания конкурентов
 - б) Обозначения центров связывания или точек в фармакофорных моделях
 - в) Увеличения массы молекулы
 - г) Печати на 3D-принтере
44. **Что такое «Solvation energy» (энергия сольватации)?**
- а) Энергия взрыва
 - б) Энергия, затрачиваемая или выделяемая при переносе молекулы из вакуума в растворитель
 - в) Скорость вращения мешалки
 - г) Напряжение в сети
45. **Какая стадия НИД следует за успешным виртуальным скринингом и докингем?**
- а) Сдача отчета и закрытие темы
 - б) Экспериментальное тестирование (in vitro) отобранных соединений
 - в) Покупка нового компьютера
 - г) Изменение названия дисциплины
46. **База данных ChEMBL в НИД используется для:**
- а) Проверки орфографии
 - б) Поиска экспериментальных данных о биологической активности малых молекул
 - в) Заказа химических реактивов
 - г) Общения химиков
47. **Что описывает SMILES-строка «C1=CC=CC=C1»?**
- а) Глюкозу
 - б) Бензол
 - в) Воду
 - г) Аспирин
48. **Зачем нужно «хеширование» молекул (InChIKey) при работе с базами данных?**
- а) Для защиты от хакеров
 - б) Для создания уникального короткого идентификатора структуры для быстрого поиска
 - в) Для изменения свойств вещества
 - г) Для шифровки формул от студентов
49. **Что такое «QSAR-модель» в научно-исследовательской деятельности?**
- а) Рисунок молекулы

- б) Математическое уравнение, связывающее структуру со свойством
- в) Название программного обеспечения
- г) План лаборатории

50. В НИД использование Open Source программ (например, RDKit) предпочтительно для:

- а) Экономии бумаги
- б) Автоматизации обработки больших массивов химических данных с помощью скриптов
- в) Игр в свободное время
- г) Создания презентаций

51. Как называется процесс перевода 2D-рисунка молекулы в 3D-модель с минимальной энергией?

- а) Сканирование
- б) Конформационный анализ (или геометрическая оптимизация)
- в) Дистилляция
- г) Фотография

52. Что такое «Molecular Descriptor»?

- а) Описание запаха вещества
- б) Числовая характеристика молекулы, рассчитанная по её структуре
- в) Имя автора открытия
- г) Инструкция к препарату

53. Для решения задачи классификации «активен/неактивен» в НИД часто применяют:

- а) Линейку
- б) Машинное обучение (Random Forest, SVM и др.)
- в) Метод взвешивания
- г) Опрос экспертов

54. Что моделирует алгоритм «Genetic Algorithm» при поиске активных соединений?

- а) Генетику человека
- б) Эволюционный процесс отбора лучших решений (структур или конформаций)
- в) Рост бактерий в чашке Петри
- г) Скрещивание растений

55. Для чего при разработке БАВ анализируют «Metabolic stability» (метаболическую стабильность)?

- а) Для оценки срока годности на складе
- б) Для понимания того, как быстро вещество будет разрушаться ферментами организма
- в) Для определения температуры плавления
- г) Для выбора цвета капсул

56. Термин «Scaffold hopping» означает:

- а) Прыжки по лаборатории
- б) Поиск структурно новых каркасов, сохраняющих ту же биологическую активность

- в) Смену темы диссертации
 - г) Ошибку в расчете циклов
57. **База данных DrugBank полезна исследователю для:**
- а) Покупки лекарств со скидкой
 - б) **Получения детальной информации о разрешенных лекарствах и их мишенях**
 - в) Чтения новостей медицины
 - г) Записи на прием к врачу
58. **Что такое «Lipophilicity» и почему она важна для НИД?**
- а) Растворимость в воде; важна для инъекций
 - б) **Сродство к жирам; определяет способность БАВ проникать через клеточные мембраны**
 - в) Вязкость масла; важна для смазки приборов
 - г) Способность гореть
59. **Использование GPU (графических процессоров) в хемоинформатике позволяет:**
- а) Улучшить качество печати отчета
 - б) **Значительно ускорить молекулярное моделирование и скрининг**
 - в) Слушать музыку во время работы
 - г) Заряжать телефон
60. **Итогом успешного решения задачи НИД по поиску БАВ является:**
- а) Список всех существующих молекул
 - б) **Обоснованная рекомендация конкретных структур для синтеза и биоиспытаний**
 - в) Удаление всех файлов с компьютера
 - г) Поломка спектрометра

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

1. Какие дескрипторы используются в методе сравнительного анализа молекулярных полей?
 - а) Значения оценочных функций молекулярного докинга для комплексов молекулы с мишенью
 - б) **Энергии взаимодействия молекулы с пробной частицей в узлах трехмерной решетки**
 - в) Энергия молекулы в связанной конформации
 - г) Энергия взаимодействия молекулы с мишенью
2. В чем особенность полужесткого молекулярного докинга?
 - а) **Допускается варьирование конформации лиганда (вращение вокруг связей) при фиксированной структуре мишени**
 - б) Допускается варьирование конформации боковых цепей аминокислот мишени (вращение вокруг связей) при фиксированной структуре лиганда
 - в) Прогнозируется несколько вариантов способа связывания
 - г) Допускаются небольшие искажения структуры лиганда и мишени

3. В чем недостатки использования подструктурных дескрипторов для анализа связи структура–активность?

- а) Для построения хороших моделей обычно требуется применение искусственных нейронных сетей
- б) Число возможных фрагментов в реальных задачах слишком велико
- в) Этот подход невозможно использовать для прогноза активности к конкретным мишеням
- г) **Затруднителен учет взаимного расположения фрагментов и прогнозирование для новых типов структур**

4. В чем особенности моделирования структуры белков?

- а) Благодаря современным экспериментальным методам можно получить структуру любого белка, что делает моделирование излишним
- б) **Большое число степеней свободы и возможных конформаций делает невозможной прямую оптимизацию структуры**
- в) Благодаря ограниченному числу аминокислот в линейной полипептидной цепи ее конформацию легко предсказать
- г) Точность моделирования структуры не зависит от конкретной последовательности

5. На какие параметры опирается прогнозирование активности в методе Хэнча?

- а) **Простые физико-химические дескрипторы для молекулы в целом или отдельных заместителей**
- б) Вклады заместителей в активность
- в) Число вхождений различных подструктурных фрагментов в структуру
- г) Значения индексов Рандича

6. Какой вид имеет зависимость энергии деформации валентных углов от угла между связями?

- а) **Парабола**
- б) Синусоида
- в) Гипербола
- г) Сложная форма зависимости

7. Какие данные не обязательны для задания молекулярного графа?

- а) Набор атомов (вершин) в структуре
- б) Набор связей (ребер) между атомами в структуре
- в) **Координаты атомов в пространстве**
- г) Химические атрибуты атомов и связей

8. В чем преимущество искусственных нейронных сетей при построении моделей?

- а) Высокая скорость расчетов
- б) Легкость интерпретации полученных моделей
- в) Высокая предсказательная способность
- г) **Возможность универсальной аппроксимации широкого класса нелинейных зависимостей**

9. Какой вид имеет зависимость энергии электростатического взаимодействия от расстояния между атомами?

- а) Парабола
- б) Синусоида
- в) **Гипербола**

- г) Сложная форма зависимости

10. В чем преимущества использования подструктурных дескрипторов для анализа связи структура–активность?

- а) Для построения хороших моделей обычно требуется применение искусственных нейронных сетей
- **б) Совокупность подструктурных фрагментов позволяет описать тонкие особенности структуры и их влияние на активность, а модель при определенных условиях допускает структурную интерпретацию**
- в) Этот подход невозможно использовать для прогноза активности к конкретным мишеням
- г) Затруднителен учет взаимного расположения фрагментов и прогнозирование для новых типов структур

11 Какая стратегия поиска БАВ наиболее эффективна, если известна 3D-структура белка-мишени?

- а) Лиганд-ориентированный дизайн
- **б) Дизайн на основе структуры мишени (Structure-based drug design)**
- в) Случайный скрининг всех доступных веществ
- г) Метод Фри-Уилсона

12. **Основная цель использования виртуального скрининга в исследовательском проекте — это:**

- а) Полная замена биологических испытаний
- **б) Приоритизация соединений для экспериментального тестирования из больших библиотек**
- в) Расчет стоимости синтеза одной молекулы
- г) Определение названия вещества по IUPAC

13. **Для решения задачи «Scaffold hopping» (поиск новых классов соединений с той же активностью) лучше всего подходит:**

- а) 2D-поиск по точному совпадению
- **б) 3D-фармакофорный поиск или поиск по сходству молекулярных полей**
- в) Расчет молекулярного веса
- г) Сравнение температур плавления

14. **Что такое «библиотека фокусированная» (focused library) в задачах НИР?**

- а) Набор случайно выбранных молекул
- **б) Набор соединений, отобранных по признакам сходства с известными ингибиторами конкретной мишени**
- в) Список книг в научной библиотеке
- г) Набор молекул с одинаковым количеством атомов

15. **Использование фильтров «PAINS» (Pan-Assay Interference Compounds) в скрининге позволяет:**

- а) Найти самые активные вещества
- **б) Исключить структуры, склонные давать ложноположительные результаты в тестах (артефакты)**

- в) Увеличить растворимость веществ
- г) Рассчитать токсичность для рыб

16. **Процедура молекулярного докинга в НИР используется для:**

- а) Измерения массы белка

- б) **Предсказания ориентации лиганда в активном центре и оценки силы его связывания**
- в) **Определения последовательности аминокислот**
- г) **Расчета концентрации раствора**
- 17. **Что является ключевым результатом метода «De novo дизайн»?**
- а) **Модификация старого лекарства**
- б) **Генерация совершенно новых структур «с нуля» непосредственно в сайте связывания белка**
- в) **Поиск аналогов в базе данных PubChem**
- г) **Написание литературного обзора**
- 18. **База данных ChEMBL чаще всего используется исследователями для:**
- а) **Заказа реактивов**
- б) **Извлечения данных о биологической активности (IC50, Ki) малых молекул из литературы**
- в) **Проверки орфографии в статьях**
- г) **Просмотра новостей химии**
- 19. **Что такое «ADMET-профилирование» на этапе проектирования БАВ?**
- а) **Метод очистки вещества**
- б) **Компьютерная оценка всасывания, распределения, метаболизма, выведения и токсичности**
- в) **Тип спектроскопии**
- г) **Система учета лабораторного оборудования**
- 20. **Для оценки инновационности разработанной структуры исследователь проверяет её новизну в базе:**
- а) **PubChem / SciFinder / Reaxys**
- б) **Википедия**
- в) **Microsoft Word**
- г) **Google Maps**
- 21. **Что такое «фармакофор» в контексте поиска новых БАВ?**
- а) **Прибор для измерения активности**
- б) **Пространственное расположение признаков (групп), необходимых для биологического эффекта**
- в) **Название химической аптеки**
- г) **Вещество, вызывающее свечение**
- 22. **Для подготовки структуры белка из базы PDB к докингу необходимо:**
- а) **Удалить все атомы углерода**
- б) **Добавить атомы водорода, при необходимости удалить воду и лиганды сокристаллизации**
- в) **Изменить порядок аминокислот**
- г) **Сжать файл архиватором**
- 23. **Что моделирует метод гомологичного моделирования (Homology Modeling)?**
- а) **Синтез гомологов метана**
- б) **3D-структуру белка на основе структуры похожего белка с известной кристаллографией**
- в) **Влияние давления на реакцию**
- г) **Рост кристаллов сахара**
- 24. **В докинге «Scoring Function» (оценочная функция) служит для:**
- а) **Подсчета количества атомов**
- б) **Ранжирования найденных поз лиганда по их теоретической энергии связывания**
- в) **Измерения времени расчета**

- г) Определения pH
- 25. **Что такое «Lead Optimization» (оптимизация лида) в цикле разработки БАВ?**
 - а) Поиск самого дешевого поставщика
 - б) Целенаправленная модификация структуры «хита» для улучшения его свойств
 - в) Увеличение скорости печати отчета
 - г) Переход к испытаниям на людях
- 26. **Использование программы RuMOL в НИР по хемоинформатике необходимо для:**
 - а) Написания формул
 - б) Визуализации и анализа трехмерных моделей комплексов белок-лиганд
 - в) Расчета молекулярной массы
 - г) Создания электронных таблиц
- 27. **Что такое «SMILES» в контексте обработки данных?**
 - а) Смайлики в чате исследователей
 - б) Линейная текстовая запись химической структуры для компьютерной обработки
 - в) Тип химической реакции
 - г) Название метода титрования
- 28. **Для чего при поиске аналогов используется «Similarity Search» по коэффициенту Танимото?**
 - а) Для поиска самых дешевых аналогов
 - б) Для количественной оценки степени сходства молекул по их дескрипторам
 - в) Для определения плотности жидкости
 - г) Для измерения радиоактивности
- 29. **Метод молекулярной динамики (MD) позволяет исследователю:**
 - а) Получить статичную картинку молекулы
 - б) Изучить стабильность комплекса белок-лиганд во времени с учетом теплового движения
 - в) Рассчитать выход продукта в процентах
 - г) Определить цену за грамм вещества
- 30. **Что такое «Binding Pocket» (карман связывания)?**
 - а) Место для хранения реактивов
 - б) Углубление в структуре белка, где происходит взаимодействие с БАВ
 - в) Карман в халате химика
 - г) База данных цен на лекарства
- 31. **Для решения задачи предсказания токсичности («in silico toxicology») используют:**
 - а) Микроскоп
 - б) QSAR-модели, обученные на экспериментальных данных о токсичности (LD50, тест Эймса)
 - в) Весы
 - г) Опрос экспертов
- 32. **В чем преимущество использования «клик-химии» при создании библиотек БАВ?**
 - а) Громкие звуки при реакции
 - б) Высокая селективность, скорость и надежность получения сложных структур из блоков
 - в) Низкая температура кипения

- г) Использование золотых катализаторов
- 33. **Что такое «Molecular Fingerprints»?**
 - а) Отпечатки пальцев на пробирке
 - б) Битовые векторы, кодирующие наличие структурных фрагментов в молекуле
 - в) Фотографии молекул
 - г) Список авторов публикации
- 34. **Для чего в НИР анализируют «Induced Fit» (индуцированное соответствие)?**
 - а) Для проверки точности весов
 - б) Для учета изменения формы активного центра белка при вхождении в него лиганда
 - в) Для настройки микроскопа
 - г) Для оценки чистоты растворителя
- 35. **Формат файлов .PDB содержит информацию о:**
 - а) Ценах на препараты
 - б) 3D-координатах атомов макромолекул и лигандов
 - в) Тексте диссертации
 - г) Видеозаписи эксперимента
- 36. **Что такое «Pharmacophore Mapping»?**
 - а) Создание географической карты аптек
 - б) Построение модели расположения ключевых центров взаимодействия (Н-связи, гидрофобность)
 - в) Расчет маршрута доставки реактивов
 - г) Изучение истории фармации
- 37. **Какое свойство описывает дескриптор \$logP\$ при проектировании БАВ?**
 - а) Кислотность
 - б) Липофильность (способность проникать через мембраны)
 - в) Молекулярный объем
 - г) Число атомов азота
- 38. **Для быстрого скрининга миллионов молекул по форме используется:**
 - а) Рентгеноструктурный анализ каждой
 - б) 3D-shape similarity (сравнение трехмерных контуров молекул)
 - в) Взвешивание на аналитических весах
 - г) Ручное рисование структур
- 39. **Что такое «Hit-to-Lead» стадия?**
 - а) Перевод текста статьи
 - б) Процесс превращения первичного активного соединения в более перспективное («лид»)
 - в) Проверка на плагиат
 - г) Увольнение руководителя
- 40. **В хемоинформатике термин «In silico» означает:**
 - а) В стекле (пробирке)
 - б) В компьютере (путем моделирования)
 - в) В живом организме
 - г) В вакууме
- 41. **Что такое «Rotatable Bonds» (вращающиеся связи) и почему они важны?**
 - а) Связи, которые можно сломать
 - б) Определяют конформационную гибкость молекулы и её энтропию при связывании

- в) Связи внутри бензольного кольца
- г) Относятся только к газам
- 42. Для чего используется алгоритм «Lipinski's Rule of Five»?
 - а) Для оценки взрывоопасности
 - б) Для оценки вероятности хорошего всасывания препарата в ЖКТ
 - в) Для расчета числа стадий синтеза
 - г) Для оценки сложности модели
- 43. Что такое «Solvation Energy» (энергия сольватации)?
 - а) Энергия взрыва
 - б) Энергия, выделяемая или поглощаемая при переходе молекулы в раствор
- в) Энергия солнечного света
 - г) Мощность мешалки
- 44. База данных ZINC предназначена для:
 - а) Изучения сплавов цинка
 - б) Получения 3D-моделей коммерчески доступных соединений для скрининга
- в) Поиска вакансий для химиков
 - г) Хранения личных фотографий
- 45. Какое значение энергии связи в докинге указывает на более сильное взаимодействие?
 - а) +10 ккал/моль
 - б) -12 ккал/моль
 - в) 0 ккал/моль
 - г) +100 ккал/моль
- 46. Что такое «QSAR» (Quantitative Structure-Activity Relationship)?
 - а) Качественный анализ смеси
 - б) Количественная связь между структурой и биологической активностью
- в) Название фирмы-производителя ПО
 - г) Государственный стандарт качества
- 47. Для чего в НИР используется «Virtual Library Generation»?
 - а) Для оцифровки учебников
 - б) Для компьютерной генерации новых гипотетических структур для последующего отбора
- в) Для покупки книг онлайн
 - г) Для создания архива статей
- 48. Что описывает «Molecular Surface Area»?
 - а) Вес молекулы
 - б) Площадь поверхности молекулы, доступную для растворителя или рецептора
- в) Длину химической связи
 - г) Количество электронов
- 49. Что такое «Bioisosteres» (биоизостеры)?
 - а) Изотопы углерода
 - б) Группы атомов со схожими свойствами, которыми можно заменять фрагменты в БАВ
- в) Бактерии, живущие в реакторе
 - г) Одинаковые по массе молекулы
- 50. Для предсказания метаболизма лекарств в печени (ферменты CYP450) используют:
 - а) Титрование

- б) Специализированные модели метаболического предсказания (напр. SMARTCyp)
- в) Центрифугирование
- г) Термический анализ
- 51. Что такое «Scoring» в виртуальном скрининге?
 - а) Набор текста
 - б) Процесс оценки и ранжирования молекул по их предсказанной активности
 - в) Очистка базы от дублей
 - г) Подсчет числа страниц в отчете
- 52. Использование скриптового языка Python в хемоинформатике позволяет:
 - а) Рисовать плакаты
 - б) Автоматизировать обработку тысяч молекул и строить сложные модели
 - в) Заменить лаборанта на синтезе
 - г) Увеличить давление в реакторе
- 53. Что такое «Active Learning» в разработке БАВ?
 - а) Активное посещение лекций
 - б) Итеративный процесс, где модель сама выбирает, какие вещества нужно протестировать следующими
 - в) Быстрый синтез веществ
 - г) Спортивная ходьба в лаборатории
- 54. Что моделирует «Quantum Chemistry» (квантовая химия) в задачах НИД?
 - а) Цену электричества
 - б) Электронное строение молекул и параметры, которые нельзя получить классическими методами
 - в) Движение транспорта в городе
 - г) Поведение персонала
- 55. Для чего нужен «Molecular Docking Validation» (валидация докинга)?
 - а) Чтобы получить подпись начальника
 - б) Чтобы убедиться, что выбранный метод докинга способен воспроизвести известную структуру
 - в) Чтобы компьютер не сломался
 - г) Чтобы увеличить время расчета
- 56. Что такое «Toxicity Prediction»?
 - а) Предсказание конца света
 - б) Прогноз нежелательных побочных эффектов вещества на компьютерной модели
 - в) Измерение кислотности
 - г) Оценка запаха
- 57. База данных PubChem содержит:
 - а) Только рецепты лекарств
 - б) Обширную информацию о структурах и биологических свойствах миллионов малых молекул
 - в) Музыку для химиков
 - г) Списки абитуриентов
- 58. Что такое «Conformational Search» (конформационный поиск)?
 - а) Поиск конфорки на плите
 - б) Поиск всех возможных пространственных форм, которые может принимать гибкая молекула

○ в) Поиск похожих по названию веществ

○ г) Поиск информации в интернете

59. **Что описывает «Hydrogen Bond Donor/Acceptor» дескриптор?**

○ а) Цену водорода на рынке

○ б) **Способность молекулы образовывать водородные связи с мишенью**

○ в) Количество воды в образце

○ г) Вес баллона с газом

60. **Конечная цель применения знаний по ПК-5.3 в магистерской**

диссертации:

○ а) Накопление большого количества файлов

○ б) **Разработка обоснованных рекомендаций по созданию новых**

эффективных БАВ

○ в) Изучение клавиатуры компьютера

○ г) Проведение досуга

Задания открытого типа:

ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.

1. Что представляют собой дескрипторы молекулярной структуры?

Ответ: Дескрипторы молекулярной структуры – это числовые параметры, описывающие те или иные особенности и аспекты структуры соединения, в частности, для построения моделей связи структура–свойство и структура–активность. Разнообразие доступных дескрипторов почти не ограничено, однако в модель целесообразно включать наиболее значимые дескрипторы, желательные связанные с механизмом действия соединений и допускающие возможность интерпретации.

2. С чем может быть связано переучивание модели?

Ответ: Переученная модель отличается избыточной сложностью (содержит больше параметров или вкладов, чем оправдано данными), что приводит к завышенной точности на обучающей выборке за счет описания случайного шума исходных данных и высокой чувствительности к небольшим флуктуациям данных, а это вызывает ухудшение точности моделирования ожидаемой зависимости, высокие ошибки прогноза и низкую предсказательную способность.

3. Какие вклады обычно включаются в модель силового поля?

Ответ: Как правило, в модель силового поля включаются вклады энергии деформации связей, энергии деформации валентных углов, торсионные энергии, а также энергии кулоновского и вандерваальсова взаимодействия ковалентно несвязанных атомов. Некоторые силовые поля могут содержать также вклады, описывающие другие виды взаимодействий.

4. В чем преимущество метода регрессии частичных наименьших квадратов?

Ответ: Регрессия частичных наименьших квадратов – это линейный регрессионный метод, который благодаря переходу из исходного пространства дескрипторов в низкоразмерное пространство скрытых переменных позволяет корректно строить предсказательные модели в условиях избытка дескрипторов и/или их взаимной корреляции, а также использовать эти взаимосвязи для повышения надежности моделей и контроля области применимости.

5. Что представляют собой инварианты молекулярного графа?

Ответ: Инвариант молекулярного графа – это его числовая характеристика, которая не изменяется при перенумерации атомов, что позволяет использовать ее в качестве дескриптора.

6. Какие проблемы с регрессионной моделью легко выявить при анализе графиков соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений?

Ответ: Визуальное (графическое) сопоставление экспериментальных и прогнозируемых по модели величин активности дополняет числовые характеристики качества, а также позволяет выявлять проблемы, требующие анализа и решения. В нормальной ситуации на графике наблюдается небольшой случайный разброс вокруг идеальной прямой. Среди возможных проблем, хорошо заметных на графике: отклонения от линейности и систематические ошибки; выбросы, т.е. соединения, для которых ошибка прогноза сильно превышает средний уровень; группировка данных, которая уменьшает реальное число степеней свободы и ухудшает надежность модели. Во всех таких случаях необходимо обязательно выявить причины проблемы и по возможности устранить их, усовершенствовать модель либо уточнить ее область применимости.

7. Как определяется валентный индекс Рандича?

Ответ: Валентный индекс Рандича χ^v представляет собой обобщение индекса Рандича, которое позволяет различать структуры с гетероатомами и/или кратными связями. Подобно обычному индексу Рандича, он определяется суммированием по связям $\chi^v = \sum_{\text{связи}} \frac{1}{\sqrt{\delta_i^v \delta_j^v}}$, где вместо степени вершины используется т.н. валентная степень вершины $\delta^v = \frac{z_v - h}{z - z_v - 1}$, где z – общее число электронов, z_v – число валентных электронов, h – число присоединенных атомов водорода (для всех атомов второго периода знаменатель равен 1). Для насыщенных атомов углерода δ^v совпадает со степенью вершины δ .

8. Что общего и в чем различия между методами анализа главных компонент и регрессии частичных наименьших квадратов?

Ответ: Как метод анализа главных компонент, так и метод регрессии частичных наименьших квадратов представляют собой линейные модели, опирающиеся на принцип проекции на скрытые переменные, т.е. переходу из исходного пространства дескрипторов в низкоразмерное пространство скрытых переменных, отражающих взаимные корреляции между дескрипторами. Метод анализа главных компонент позволяет описать внутреннюю структуру массива дескрипторов, описывающих соединения выборки, что можно использовать для снижения размерности, оценки сходства соединений и визуализации химического пространства. В методе регрессии частичных наименьших квадратов проекция на скрытые переменные используется для корректного построения надежных предсказательных моделей связи структура–активность (особенно в условиях избытка дескрипторов и/или их взаимной корреляции), а также контроля области применимости.

9. Чем отличаются внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей?

Ответ: Для внешнего контроля используется отдельная (независимая) контрольная выборка, т.е. набор соединений с известной экспериментальной активностью, которые не использовались при построении модели, поэтому сравнение прогнозируемых и экспериментальных значений позволяет оценить точность прогнозов. Недостатками этого подхода являются неэффективное использование ресурсов и потеря части информации о связи структуры и активности, а также зависимость оценок от конкретного набора

соединений в контрольной выборке и/или способа ее выделения. Эти проблемы можно в значительной степени преодолеть с помощью тех или иных методов внешнего контроля – эвристического подхода, в рамках которого один и тот же набор данных применяется как для построения модели, так и для контроля. Он опирается на рассмотрение множества подвыборок из исходного набора соединений, причем на каждом шаге модель строится по одним подвыборкам и проверяется по другим, а затем формируются сводные оценки качества прогнозов. Наиболее простым и распространенным методом внешнего контроля является т.н. перекрестный контроль.

10. Что представляют собой дескрипторы STERIMOL?

Ответ: Стерические дескрипторы STERIMOL определяются для заместителей, присоединенных выделенной связью к остальной молекуле. Чаще всего применяют три параметра: L – длина заместителя в направлении связи, B1 – минимальная ширина перпендикулярно связи, B5 – максимальная ширина перпендикулярно связи.

ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.

1. Какие типы фармакофорных центров могут включаться в фармакофорные модели?

Ответ: Различные методы опираются на разные наборы типов фармакофорных центров, т.е. точек, отражающих положение в пространстве групп, способных к межмолекулярному взаимодействию. В частности, могут рассматриваться положительные и отрицательные заряды, доноры и акцепторы водородной связи, гидрофобные группы, объемные группы, циклические системы и т.д. Как правило, дополнительно учитывается форма молекул.

2. Что общего между водородными и галогенными связями?

Ответ: Оба этих типа связей являются трехцентровыми, причем в качестве акцептора выступает неподеленная пара электроотрицательного атома (O, N, S) или ароматическая система. Вторым участником (донором) в случае водородной связи выступает поляризованная связь X–H (X=O, N, S, C), а в случае галогенной связи – σ^* -дырка, т.е. свободная несвязывающая σ -орбиталь на продолжении связи C–X (X=Cl, Br, I), создающая локальную область положительного электростатического потенциала.

3. Какие этапы включает процедура виртуального скрининга?

Ответ: В общем случае процедура виртуального скрининга может включать получение или формирование исходного массива структур (например, из баз данных или с помощью алгоритмов генерации или конструирования), их предварительный отбор (в частности, с учетом подобия лекарствам и наличия нежелательных групп), подготовку структур для конкретных методов фильтрации, а также один или несколько специфических фильтров, которые с помощью тех или иных методов дают прогнозы наличия целевой активности. В итоге формируется фокусированная библиотека перспективных структур, для которых наиболее вероятно проявление нужной активности и/или комплекса других свойств.

4. Какие процессы в основном определяют влияние липофильности соединения на биоактивность?

Ответ: Влияние липофильности соединения на биоактивность прежде всего связано с пассивным транспортом вещества через мембраны и другие биологические барьеры. Приближенно его можно рассматривать как двухстадийный процесс, включающий переход вещества из внеклеточной водной среды в неполярную мембранную микрофазу, а затем его выход из нее во внутриклеточную водную среду. Для гидрофильных (полярных)

молекул лимитирующей будет первая стадия, а для гидрофобных (неполярных) – вторая. Таким образом, наиболее высокая скорость транспорта (и/или стационарная концентрация) активного соединения должна достигаться при промежуточном (оптимальном) уровне липофильности, который обеспечивает баланс полярности и гидрофобности, тогда как при отклонении от него в ту или другую сторону биодоступность и наблюдаемая активность соединения будут снижаться.

5. Какие существуют варианты молекулярного докинга с точки зрения учета изменений конформации лиганда и мишени при связывании (индуцированного соответствия)?

Ответ: Ряд вариантов молекулярного докинга различается по степени учета изменений конформации лиганда и мишени при связывании (индуцированного соответствия), что сопряжено с различным уровнем вычислительных затрат. В наиболее простом, жестком докинге конформации лиганда и мишени фиксированы, тогда как при полностью гибком докинге и конформация лиганда, и конформация мишени могут меняться. Оптимальный на данный момент баланс точности и скорости обеспечивает полужесткий (полугибкий) докинг, в котором конформация лиганда может меняться (прежде всего за счет вращения вокруг связей), а конформация мишени фиксирована (возможно, за исключением боковых цепей отдельных аминокислотных остатков). Альтернативные подходы вместо динамического учета гибкости структуры опираются на заранее подготовленные ансамбли или библиотеки конформаций, каждая из которых затем рассматривается как фиксированная: библиотеки конформаций лигандов позволяют ограничиться жестким докингом, а ансамбль структур мишени (полученный из ряда экспериментальных структур или моделирования молекулярной динамики) дает возможность не учитывать ее подвижность.

6. Как можно увеличить липофильность соединения для повышения активности?

Ответ: Ввести в структуру неполярные заместители.

7. Какие взаимодействия стабилизируют вторичную структуру белков?

Ответ: Водородные связи между группами CO и NH в амидных связях.

8. Какие процессы в основном определяют влияние липофильности соединения на биоактивность?

Ответ: Пассивный транспорт вещества через мембраны и другие биологические барьеры.

9. Каков характер зависимости активности от липофильности соединений?

Ответ: Параболическая зависимость с максимумом.

10. На какие параметры опирается прогнозирование активности в методе Хэнча?

Ответ: Простые физико-химические дескрипторы для молекулы в целом или отдельных заместителей.

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

1. Какие типы дескрипторов применяются в классическом QSAR?

Ответ: В классическом QSAR преимущественно применяются простые физико-химические дескрипторы для молекулы в целом или конкретного заместителя, например, значения липофильности, липофильные константы, электронные константы Гаммета, стерические константы Тафта и др.

2. Какие данные можно задавать для молекулярного графа?

Ответ: Как и для любого графа, необходимо задать набор вершин (атомов в структуре), а также набор ребер (связей между атомами). В молекулярном графе также могут задаваться химические атрибуты атомов и связей (тип атома, формальный заряд, число атомов водорода, частичный заряд, тип связи и т.д.) и, при необходимости, координаты атомов в пространстве или на плоскости.

3. В каких ситуациях целесообразно применение гибридных методов квантовой и молекулярной механики?

Ответ: Гибридные методы квантовой и молекулярной механики целесообразно применять, когда интерес представляют процессы перераспределения электронов (например, химические реакции или поляризация) в большой и сложной молекулярной системе, которую невозможно адекватно описать средствами квантовой химии. Они опираются на выделение в системе небольшой «квантовой» подсистемы, при этом остальная ее часть («классическая подсистема») описывается моделью молекулярной механики, и дополнительно учитывается взаимодействие между подсистемами.

4. Какие методы анализа связи структура–активность допускают направленное конструирование активных структур по модели?

Ответ: Направленное конструирование активных структур по модели возможно, если она дает четкую картину влияния структурных особенностей соединения на активность, например, определяет вклады конкретных заместителей или фрагментов, как в методе Фри-Уилсона, или наглядные карты активности/селективности, как в методах анализа топологии молекулярного поля (MFTA) и сравнительного анализа молекулярных полей (CoMFA). Поскольку зависимости структура–активность обычно имеют сложный многофакторный характер, сконструированные таким образом структуры целесообразно проверять путем прогнозирования по полной модели. Другими словами, конструирование по модели оказывается одним из способов генерации структур для виртуального скрининга.

5. Как можно использовать выраженную в уравнении Хэнча зависимость активности от липофильности для оптимизации активности в ряду родственных соединений?

Ответ: Как правило, зависимость активности от липофильности в рамках ряда родственных соединений при изменении липофильности в достаточно широком диапазоне имеет вид колоколообразной кривой с максимумом. Это связано главным образом с тем, что для проникновения соединения через биологические мембраны и другие барьеры в организме необходим определенный баланс гидрофобности и полярности. С помощью уравнения Хэнча можно точно установить положение максимума (оптимальное значение липофильности), а затем подобрать наиболее близкие к нему структуры.

6. Каким образом можно представить химическую структуру для хранения в базах данных и обработки?

Ответ: Наиболее мощным и универсальным решением является представление химических структур в виде молекулярных графов, в которых задан набор вершин (атомов в структуре), набор ребер (связей между атомами), а также химические атрибуты атомов и связей (тип атома, формальный заряд, число атомов водорода, частичный заряд, тип связи и т.д.) и, при необходимости, координаты атомов в пространстве или на плоскости. Поскольку валентность (число связей) у большинства атомов невелика, обычно наиболее эффективны различные компактные представления, например, списки связей. Альтернативный способ представления, отличающийся небольшим размером, опирается на строчные кодировки типа SMILES.

7. На чем основан метод моделирования структуры белков по гомологии?

Ответ: Моделирование структуры белков по гомологии оказывается возможным, потому что природные белки представляют собой не случайные сополимеры аминокислот, а результат биологической эволюции. Благодаря этому они адаптированы к выполняемым в организме функциям (в частности, легко и быстро принимают нативную конформацию), а в структурах различных белков (не обязательно связанных эволюционно и/или выполняющих близкие функции) часто присутствуют общие структурные элементы и мотивы укладки и четвертичной структуры. Это позволяет приближенно спрогнозировать пространственную структуру белка по известной аминокислотной последовательности и экспериментально определенной структуре одного или нескольких белков с похожими последовательностями (белков-шаблонов), рассматривая вызванные изменениями последовательности «возмущения» структуры.

8. Вероятность каких проблем при разработке лекарства уменьшается при соблюдении условий подобия лекарствам?

Ответ: Нарушение условий подобия лекарствам часто указывает на более высокие риски таких мешающих разработке лекарства проблем, как плохие фармакокинетические свойства (биодоступность) вещества, сложность синтеза и выделения соединения, низкая селективность из-за большого числа способных к взаимодействиям групп.

9. Какие методы анализа связи структура–активность допускают направленное конструирование активных структур по модели?

Ответ: Направленное конструирование активных структур по модели возможно, если она дает четкую картину влияния структурных особенностей соединения на активность, например, определяет вклады конкретных заместителей или фрагментов, как в методе Фри-Уилсона, или наглядные карты активности/селективности, как в методах анализа топологии молекулярного поля (MFTA) и сравнительного анализа молекулярных полей (CoMFA). Поскольку зависимости структура–активность обычно имеют сложный многофакторный характер, сконструированные таким образом структуры целесообразно проверять путем прогнозирования по полной модели. Другими словами, конструирование по модели оказывается одним из способов генерации структур для виртуального скрининга.

10. В чем значение классического QSAR?

Ответ: Исследования в рамках «классического QSAR» прежде всего обеспечили формирование парадигмы количественного анализа связи «структура–активность» (включая, в частности, роль молекулярных дескрипторов, необходимость учета нескольких характеристик структуры, применение математических/статистических моделей и компьютеров) и способствовали признанию этого подхода специалистами по медицинской химии. Кроме того, они продемонстрировали важность липофильности/гидрофобности как свойства, сильно влияющего на величину активности, возможность определения оптимального уровня липофильности в ряду соединений и эффективность ее прогнозирования или оценки по структуре соединения. Наконец, простые модели такого типа по-прежнему остаются полезными для анализа связи структура–активность в простых задачах для ограниченных рядов соединений или заместителей.

4. ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ КОНТРОЛЬ

4.1. ФОС для **промежуточной аттестации** обучающихся по дисциплине «Хемоинформатика» предназначен для оценки степени достижения запланированных результатов обучения по завершению изучения дисциплины в установленной учебным планом форме и позволяют определить результаты освоения дисциплины.

Итоговой формой контроля сформированности компетенций и индикаторов их достижения у обучающихся по дисциплине является *зачет с оценкой*.

ФОС промежуточной аттестации состоит из вопросов к зачету с оценкой по дисциплине.

4.2. Оценивание обучающегося зачете с оценкой

Оценка зачета с оценкой	Требования к знаниям
«отлично»	Оценка «отлично» выставляется обучающемуся, если он глубоко и полностью усвоил материал; исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает; умеет тесно увязывать теорию с практикой; свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий; использует в ответе материал из различных литературных источников; правильно обосновывает принятое решение; владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач,
«хорошо»	Оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал; грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос; правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач; владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения, а также имеет достаточно полное представление о значимости знаний по дисциплине, ...
«удовлетворительно»	Оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей; допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала; испытывает сложности при выполнении практических работ и затрудняется связать теорию вопроса с практикой, ...
«неудовлетворительно»	Оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части материала; неуверенно отвечает; допускает серьезные ошибки; не имеет представлений по методике выполнения практической работы. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится обучающимся, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по данной дисциплине.

4.3. Вопросы к зачету с оценкой для промежуточной аттестации

Итоговый контроль проводится в форме *зачета с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов). Количество вопросов в билете равно двум. Количество билетов равно удвоенному числу обучающихся в данной группе и составляет 20.

<p>«Утверждаю»</p> <p>зав. кафедрой ХТОС</p> <p>_____ С.В. Попков</p> <p>«__» _____ 202_ г.</p>	<p>Министерство науки и высшего образования РФ</p>
	<p>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева</p>
	<p>Кафедра химии и технологии органического синтеза</p>
	<p>18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химическая технология биологически активных веществ»</p>
	<p>«Хемоинформатика»</p>
<p align="center">Билет зачета с оценкой № 1</p> <p>1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей. Метод Фри-Уилсона. 2. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.</p>	

4.4. Перечень компетенций и индикаторов их достижения, которые сформированы у обучающихся при успешном выполнении заданий

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения: ПК-3.3, ПК-5.1, ПК-5.3.

Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК
<p>ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.</p>	<p>ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.</p>
<p>ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.</p>	<p>ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.</p>
	<p>ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.</p>

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

5.1. 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, протокол № 8, введенное в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 20.03.2020 № 27 ОД;

5.2 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;

5.3. 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, протокол № 9, введенное в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 27.03.2020 № 29 ОД.

Разработчики фонда оценочных средств по дисциплине «Хемоинформатика»:

к.х.н., доцент кафедры химии и технологии органического синтеза

Е.В. Радченко _____

к.х.н., доцент, заведующий кафедрой химии и технологии органического синтеза

С.В. Попков _____

Фонд оценочных средств по дисциплине «Хемоинформатика» одобрены на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза, протокол № 7 от «26» апреля 2024 г.

Заведующий кафедрой ХТОС

к.х.н., доцент С.В. Попков _____

Согласован:

Профессор кафедры химии и технологии биомедицинских препаратов

д.х.н., профессор Л.В. Коваленко _____

**Дополнения и изменения к фонду оценочных средств
по дисциплине «Хемоинформатика»**
(наименование дисциплины)

направления подготовки (специальности)

18.04.01 Химическая технология

код и наименование направления подготовки (специальности)

Химическая технология биологически активных веществ
(наименование профиля подготовки (магистерской программы, специализации))

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)

100

Подписан: 04:02:2026 12:00:49