

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет»
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Факультет промышленной технологии лекарств

Кафедра органической химии

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
В Т.Ч. ОЦЕНОЧНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ**

Б1.В.08 КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН МОЛЕКУЛ

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия и дизайн молекул

Формы обучения: очная

Квалификация, присваиваемая выпускникам: Магистр

Год набора: 2023

Срок получения образования: очная форма обучения – 2 года

Объем: в зачетных единицах: 6 з.е.
в академических часах: 216 ак.ч.

Разработчики:

Кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М.

Кандидат фармацевтических наук, доцент Куваева Е. В.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 № 655

Согласование и утверждение

| № | Подразделение или коллегиальный орган | Ответственное лицо | ФИО | Виза | Дата, протокол (при наличии) |
|---|---------------------------------------|--|-----------------------------|-------------|------------------------------|
| 1 | Кафедра органической химии | Ответственный за образовательную программу | Чернов Никита Максимович | Согласовано | 01.05.2022 |
| 2 | Кафедра органической химии | Заведующий кафедрой, руководитель подразделения, реализующего ОП | Яковлев Игорь Павлович | Рассмотрено | 15.06.2022, № 11 |
| 3 | Методическая комиссия факультета | Председатель методической комиссии | Алексеева Галина Михайловна | Согласовано | 01.07.2022, № 7 |

Согласование и утверждение образовательной программы

| № | Подразделение или коллегиальный орган | Ответственное лицо | ФИО | Виза | Дата, протокол (при наличии) |
|---|--|-----------------------------------|----------------------------|-------------|------------------------------|
| 1 | факультет промышленной технологии лекарств | Декан, руководитель подразделения | Куваева Елена Владимировна | Согласовано | 23.06.2022, № 11 |

СОДЕРЖАНИЕ

| | | |
|------|--|----|
| 1. | Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы | 4 |
| 2. | Место дисциплины в структуре ОП | 4 |
| 3. | Объем дисциплины и виды учебной работы | 5 |
| 4. | Содержание дисциплины | 5 |
| 4.1. | Разделы, темы дисциплины и виды занятий | 5 |
| 4.2. | Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля | 6 |
| 4.3. | Содержание занятий семинарского типа. | 9 |
| 4.4. | Содержание занятий семинарского типа | 10 |
| 4.5. | Содержание занятий семинарского типа | 10 |
| 4.6. | Содержание самостоятельной работы обучающихся | 11 |
| 5. | Порядок проведения промежуточной аттестации | 14 |
| 6. | Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины | 14 |
| 6.1. | Перечень основной и дополнительной учебной литературы | 14 |
| 6.2. | Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся | 14 |
| 6.3. | Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине | 15 |
| 6.4. | Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование | 15 |
| 7. | Методические материалы по освоению дисциплины | 16 |
| 8. | Оценочные материалы | 17 |

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения

ПК-П2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью

ПК-П2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью

Знать:

ПК-П2.1/Зн2 Знать подходы к компьютерному моделированию лекарственных молекул и понимать различия между ними.

Уметь:

ПК-П2.1/Ум2 Уметь проводить анализ и подготовку структуры мишени и лиганда.

ПК-П2.1/Ум3 Уметь проводить поиск по электронным базам данных белковых молекул и химических соединений.

ПК-П2.1/Ум4 Уметь проводить основные процедуры молекулярного моделирования (моделирование по гомологии, молекулярный докинг, молекулярная динамика) и анализировать их результаты.

ПК-П2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности

Знать:

ПК-П2.2/Зн1 Знать способы представления химических данных.

Уметь:

ПК-П2.2/Ум2 Уметь использовать дескрипторное представление химического пространства для поиска веществ требуемыми свойствами.

ПК-П2.2/Ум3 Уметь строить простейшие зависимости SAR/QSAR/QSPR.

ПК-П2.2/Ум4 Иметь представление о классических методах машинного обучения (классификация, регрессия).

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина Б1.В.08 «Компьютерный дизайн молекул» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 2.

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.09 Медицинская химия;

Б3.О.01(Д) Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.В.01(Пд) производственная практика, преддипломная практика;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Очная форма обучения

| Период обучения | Общая трудоемкость (часы) | Общая трудоемкость (ЗЕТ) | Контактная работа (часы, всего) | Лабораторные занятия (часы) | Консультации в период теоретического обучения (часы) | Консультации в период сессии (часы) | Самостоятельная работа студента (часы) | Промежуточная аттестация (часы) |
|-----------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------------|-----------------------------|--|-------------------------------------|--|---------------------------------|
| Второй семестр | 216 | 6 | 74 | 64 | 8 | 2 | 108 | Экзамен (34) |
| Всего | 216 | 6 | 74 | 64 | 8 | 2 | 108 | 34 |

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий

Очная форма обучения

| Наименование раздела, темы | Всего | Лабораторные занятия | Самостоятельная работа студента | Консультации в период сессии | Консультации в период теоретического обучения | Планируемые результаты обучения, соотнесенные с результатами освоения программы |
|--|--------------|----------------------|---------------------------------|------------------------------|---|---|
| Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул | 10,5 | 4 | 4,5 | 1 | 1 | ПК-П2.1 ПК-П2.2 |
| Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул. | 10,5 | 4 | 4,5 | 1 | 1 | |
| Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. | 104,5 | 36 | 64,5 | | 4 | ПК-П2.1 |

| | | | | | |
|---|------------|-----------|------------|----------|----------|
| Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней). | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF). | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.5. Моделирование по гомологии. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.6. Молекулярный докинг. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.7. Молекулярная динамика. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени. | 22,5 | 4 | 16,5 | | 2 |
| Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга. | 22,5 | 4 | 16,5 | | 2 |
| Раздел 3. Основы QSAR-моделирования. | 67 | 24 | 39 | 1 | 3 |
| Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений. | 9,5 | 4 | 4,5 | | 1 |
| Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR. | 8,5 | 4 | 4,5 | | |
| Тема 3.5. Основы машинного обучения. | 9,5 | 4 | 4,5 | 1 | |
| Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами. | 22,5 | 4 | 16,5 | | 2 |
| Итого | 182 | 64 | 108 | 2 | 8 |

ПК-П2.2

4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

Предмет и задачи дисциплины. Понятие о компьютерном рациональном дизайне молекул. Междисциплинарный подход в компьютерном дизайне молекул. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Работа с базами PDB, PubChem.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). Работа в PyMOL и Maestro Academic.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул.

Выравнивание белковых молекул. Работа в PyMOL и Maestro Academic.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.5. Моделирование по гомологии.

Моделирование по гомологии. Работа с сервисом SWISS-MODEL.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.6. Молекулярный докинг.

Молекулярный докинг. Работа с Autodock Vina.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.7. Молекулярная динамика.

Молекулярная динамика. Работа с GROMACS.

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
| Собеседование |

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени.

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №1 «Структура и функции белка-мишени».

Текущий контроль (очная форма обучения)

| |
|--|
| Вид (форма) контроля, оценочное средство |
|--|

Кейс-задача

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №3 «Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга».

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Кейс-задача

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования.

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.

Компьютерное представление химических соединений.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.

Понятие дескриптора, их виды.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными.

Обсуждение по теме занятия, работа в PyMOL и MaestroAcademic.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.

SAR/QSAR/QSPR. Работа с QSARToolbox, QSARDB.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Тема 3.5. Основы машинного обучения.

Основы машинного обучения. Работа с scikit-learn.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №2 «Поиск веществ с заданными свойствами».

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Кейс-задача

4.3. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Лабораторные занятия (64 ч.)

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (4 ч.)

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия "Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул".

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (36 ч.)

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней). (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия "Основы молекулярного моделирования".

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF). (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия "Основы молекулярного моделирования", работа с базами PDB, PubChem.

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа в PyMOL и Maestro Academic.

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с сервисами EMBOSS, KPAH.

Тема 2.5. Моделирование по гомологии. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с сервисом SWISS-MODEL.

Тема 2.6. Молекулярный докинг. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с Autodock Vina.

Тема 2.7. Молекулярная динамика. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с GROMACS.

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени. (4 ч.)

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №1 "Структура и функции белка-мишени".

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга. (4 ч.)

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №3 "Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга".

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования. (24 ч.)

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия.

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия.

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с библиотеками для визуализации данных (matplotlib, seaborn, plotly) и библиотеками для обработки химических данных (rdkit, obabel).

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с QSARToolbox, QSARDB.

Тема 3.5. Основы машинного обучения. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с scikit-learn.

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами. (4 ч.)

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №2.

4.4. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Консультации в период сессии (2 ч.)

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (1 ч.)

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул. (1 ч.)

Консультация по подготовке к промежуточной аттестации по контрольным вопросам и заданиям раздела "Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул".

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул.

Тема 2.5. Моделирование по гомологии.

Тема 2.6. Молекулярный докинг.

Тема 2.7. Молекулярная динамика.

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени.

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования. (1 ч.)

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными.

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.

Тема 3.5. Основы машинного обучения. (1 ч.)

1. Консультация по подготовке к промежуточной аттестации по контрольным вопросам и заданиям разделов "Основы молекулярного моделирования", "Основы QSAR-моделирования".

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.

4.5. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Консультации в период теоретического обучения (8 ч.)

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (1 ч.)

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул. (1 ч.)

Консультация по материалам основной литературы по теме "Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул".

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (4 ч.)

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул.

Тема 2.5. Моделирование по гомологии.

Тема 2.6. Молекулярный докинг.

Тема 2.7. Молекулярная динамика.

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени. (2 ч.)

Консультация по материалам основной литературы по теме "Структура и функции белка-мишени".

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга. (2 ч.)

Консультация по материалам основной литературы по теме "Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга".

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования. (3 ч.)

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений. (1 ч.)

Консультация по материалам основной литературы по теме "Компьютерное представление химических соединений".

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными.

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.

Тема 3.5. Основы машинного обучения.

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами. (2 ч.)

Консультация по материалам основной литературы по теме "Поиск веществ с заданными свойствами".

4.6. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Очная форма обучения. Самостоятельная работа студента (108 ч.)

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (4,5 ч.)

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).

2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (64,5 ч.)

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней). (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF). (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.5. Моделирование по гомологии. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.6. Молекулярный докинг. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.7. Молекулярная динамика. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени. (16,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка к решению ситуационной задачи №1 "Структура и функции белка-мишени" (12 часов).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга. (16,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка к решению ситуационной задачи №3 "Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга." (12 часов).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования. (39 ч.)

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 3.5. Основы машинного обучения. (4,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами. (16,5 ч.)

1. Изучение материалов основной литературы по соответствующей теме и лабораторных работ (3 часа).
2. Подготовка к решению ситуационной задачи «Поиск веществ с заданными свойствами» (12 часов).
3. Подготовка ответов на контрольные вопросы и задания к промежуточной аттестации (1.5 часа).

5. Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация: Экзамен, Второй семестр.

Промежуточная аттестация организована в виде экзамена. Экзамен проводится по набору экзаменационных билетов, составляемых ответственным за курс, подписываемых заведующим кафедрой и утверждаемых проректором по учебной работе. Каждый билет содержит 2 теоретических вопроса по компетенции ПК-2. Подготовка письменного ответа на задания билета составляет 45 минут, после чего следует устный опрос по заданиям билета. По итогам ответа на каждое из заданий принимается решение о сформированности компетенции. В случае несформированности компетенции ПК-2 ставится оценка «не удовлетворительно». В случае сформированности всех вынесенных на промежуточную аттестацию компетенций оценивание проводится по следующим критериям:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- умение работать с предоставленными спектральными данными;
- грамотность и связность изложения материала;
- самостоятельность работы, наличие собственной обоснованной позиции.

По итогам оценивания при условии сформированности всех вышепредставленных компетенций выставляется оценка «удовлетворительно», «хорошо» или «отлично».

Каждое из заданий экзамена оценивается по пятибалльной шкале. Оценка за экзамен по дисциплине рассчитывается как среднее арифметическое оценок за каждое из заданий экзаменационного билета в соответствии с критериями. Итоговая оценка за экзамен определяется путем обратного перевода:

3,0 – 3,5 балла – оценка «удовлетворительно»;

более 3,5 – 4,5 баллов – оценка «хорошо»;

более 4,5 – 5,00 баллов – оценка «отлично».

Если по итогам проведенной промежуточной аттестации (итоговой по дисциплине) компетенция ПК-2 не сформирована на уровне требований к дисциплине в соответствии с образовательной программой (результаты обучающегося не соответствуют критерию сформированности компетенции), обучающемуся выставляется оценка «не удовлетворительно».

6. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины

6.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

1. Молекулярное моделирование: теория и практика: учебное пособие / Х.-Д. Хельтье, В. Зипль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. - Москва: Лаборатория знаний, 2020. - 322 - 978-5-00101-724-0. - Текст: непосредственный.

6.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся

Профессиональные базы данных

1. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> - база данных химических соединений и смесей

2. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed> - База данных по биомедицинской литературе (Medline, США)

3. <https://qsar.db.org/> - База данных QSAR-моделей

Ресурсы «Интернет»

1. <https://www.rcsb.org/> - Комплекс онлайн сервисов для молекулярного моделирования биологически активных веществ
2. <https://www.ebi.ac.uk/Tools/emboss/> - Комплекс онлайн-сервисов для выравнивания последовательностей
3. <https://swissmodel.expasy.org/> - Онлайн-сервис для моделирования по гомологии
4. <http://www.way2drug.com/About.php>. - Way2Drug [сайт] : веб-ресурс для предсказания биологической активности
5. <https://colab.research.google.com/> - Онлайн-сервис Google для написания интерактивного кода на Python

6.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое свободно распространяемое и лицензионное ПО, в т.ч. MS Office.

Программное обеспечение для адаптации образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья:

Программа экранного доступа Nvda - программа экранного доступа к системным и офисным приложениям, включая web-браузеры, почтовые клиенты, Интернет-мессенджеры и офисные пакеты. Встроенная поддержка речевого вывода на более чем 80 языках. Поддержка большого числа брайлевских дисплеев, включая возможность автоматического обнаружения многих из них, а также поддержка брайлевского ввода для дисплеев с брайлевской клавиатурой. Чтение элементов управления и текста при использовании жестов сенсорного экрана.

Перечень программного обеспечения

(обновление производится по мере появления новых версий программы)

Не используется.

Перечень информационно-справочных систем

(обновление выполняется еженедельно)

Не используется.

6.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование

Для обеспечения реализации дисциплины используется оборудование общего назначения, специализированное оборудование, оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья, наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий по списку.

Специализированная многофункциональная учебная аудитория для проведения учебных занятий лекционного типа, семинарского типа (практических занятий), лабораторных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, в том числе, для организации практической подготовки обучающихся, подтверждающая наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования: проектор, персональные компьютеры с возможностью подключения к сети

Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), экран для проектора, мобильная маркерная доска (197022, город Санкт-Петербург, Аптекарский проспект, д. 6, лит. А, пом. 23Н учебная аудитория № 3 (в соответствии с документами по технической инвентаризации - часть помещения 23Н - № 5)).

Помещение для самостоятельной работы обучающихся, подтверждающее наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования: персональные компьютеры с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), маркерная доска (197022, город Санкт-Петербург, Аптекарский проспект, д. 6, лит. А, пом. 23Н учебная аудитория № 4 (в соответствии с документами по технической инвентаризации - часть помещения 23Н № 12))

Помещение для самостоятельной работы обучающихся, подтверждающее наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования: персональные компьютеры с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), маркерная доска (197022, г. Санкт-Петербург, Аптекарский проспект, д.6, лит. А пом.29Н учебная аудитория № 8(в соответствии с документами по технической инвентаризации - часть помещения 29Н № 4))

Оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (место размещения - учебно-методический отдел, устанавливается по месту проведения занятий (при необходимости)): Устройство портативное для увеличения DION OPTIC VISION - предназначено для обучающихся с нарушением зрения с целью увеличения текста и подбора контрастных схем изображения; Электронный ручной видеоувеличитель Bigger D2.5-43 TV - предназначено для обучающихся с нарушением зрения для увеличения и чтения плоскочечатного текста; Радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» PM-6-1 (заушный индиктор) - портативная звуковая FM-система для обучающихся с нарушением слуха, улучшающая восприятие голосовой информации.

7. Методические материалы по освоению дисциплины

В ходе реализации учебного процесса по дисциплине проводятся учебные занятия и выполняется самостоятельная работа. По вопросам, возникающим в процессе выполнения самостоятельной работы, проводятся консультации.

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии:

Информирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>

Консультирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>

Контроль: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>

Размещение учебных материалов: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>

Учебно-методическое обеспечение:

Чернов Н.М. Компьютерный дизайн молекул : электронный учебно-методический комплекс / Н.М.Чернов; ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России. – Санкт-Петербург, 2018. – Текст электронный // ЭИОС СПХФУ : [сайт]. – URL: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>. — Режим доступа: для авторизованных пользователей.

Методические указания по формам работы

Консультации в период теоретического обучения

Консультации в период теоретического обучения предназначены для разъяснения порядка выполнения самостоятельной работы и ответа на сложные вопросы в изучении дисциплины. В рамках консультаций проводится контроль выполнения обучающимся самостоятельной

работы. Контроль осуществляется в следующей форме:

Кейс-задачи (ситуационные задачи)

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой проблемное задание, в котором обучающемуся предлагают осмыслить реальную профессионально-ориентированную ситуацию, необходимую для решения данной проблемы.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: задания для решения ситуационных задач.

Собеседование

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: вопросы по темам/разделам дисциплины

Лабораторные занятия

Текущий контроль знаний осуществляется на лабораторных занятиях и проводится в форме:

Кейс-задачи (ситуационные задачи)

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой проблемное задание, в котором обучающемуся предлагают осмыслить реальную профессионально-ориентированную ситуацию, необходимую для решения данной проблемы.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: задания для решения ситуационных задач.

Собеседование

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: вопросы по темам/разделам дисциплины

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

1. Шкала оценивания

1.1. Уровни овладения

Компетенция: ПК-П2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью.

Индикатор достижения компетенции: ПК-П2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью.

| Уровень | Характеристика |
|------------|--|
| Повышенный | Находит рациональные способы применения методов молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью. |
| Базовый | Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью. Ошибки определяет и исправляет самостоятельно. |
| Пороговый | Знает методы молекулярного моделирования, но при применении их |

| | |
|-----------------|--|
| | для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью допускает грубые ошибки. |
| Ниже порогового | Не демонстрирует структурированных знаний о методах молекулярного моделирования и способах их применения для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью |

Индикатор достижения компетенции: ПК-П2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности.

| Уровень | Характеристика |
|-----------------|---|
| Повышенный | Рационально использует QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности, применяя структурированные знания о компьютерном представлении химических соединений, дескрипторном пространстве. |
| Базовый | Демонстрирует структурированные знания о компьютерном представлении химических соединений, дескрипторном пространстве. При использовании QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности допущенные ошибки исправляет самостоятельно. |
| Пороговый | Имеет понятие о компьютерном представлении химических соединений, дескрипторном пространстве и использовании QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности. при применении допускает грубые ошибки. |
| Ниже порогового | Не демонстрирует структурированных знаний о компьютерном представлении химических соединений, дескрипторном пространстве и использовании QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности. |

2. Контрольные мероприятия по дисциплине

| | |
|--------------------------|-----------------------------------|
| Вид контроля | Форма контроля/Оценочное средство |
| Текущий контроль | Собеседование Кейс-задача |
| Промежуточная аттестация | Экзамен |

| № п/п | Наименование раздела | Контролируемые ИДК | Вид контроля/используемые оценочные средства | |
|----------|--|---|--|------------------|
| | | | Текущий | Пром. аттестация |
| Раздел 1 | Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул | ПК-П2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью ПК-П2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической | Собеседование | Экзамен |

| | | | | |
|----------|-------------------------------------|--|------------------------------|---------|
| | | активности | | |
| Раздел 2 | Основы молекулярного моделирования. | ПК-П2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью | Собеседование Кейс-задача | Экзамен |
| Раздел 3 | Основы QSAR-моделирования. | ПК-П2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности | Собеседование Кейс-задача | Экзамен |

3. Оценочные материалы текущего контроля

Очная форма обучения

Раздел 1. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул":

1. Какие стадии разработки лекарств вы знаете? На какой стадии(-ях) разработки лекарств применяются методы компьютерного моделирования?
2. В чем состоит основная цель компьютерного моделирования в разработке лекарственных средств?
3. Назовите основные подходы к компьютерному дизайну молекул?
4. Приведите примеры методов дизайна, основанного на структуре мишени?
5. Приведите примеры методов дизайна, основанного на структуре лиганда?
6. Определение хемоинформатики, что она изучает, с помощью каких методов?
7. Определение биоинформатики, что она изучает, с помощью каких методов?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Структурная организация белковых молекул (мишеней)" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcru.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Структурная организация белковых молекул (мишеней)" :

1. Какие базы данных для получения информации о белковых мишенях вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
2. Какие базы данных для получения информации о малых молекулах вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
3. Перечислите элементы вторичной структуры белковых молекул. Как по ним можно классифицировать белковые молекулы?
4. На чем основан выбор структуры белка-мишени для моделирования?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF)" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcru.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF)" :

1. Какие базы данных для получения информации о белковых мишенях вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
2. Какие базы данных для получения информации о малых молекулах вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых

молекул (лигандов)" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов)" :

1. Перечислите элементы вторичной структуры белковых молекул. Как по ним можно классифицировать белковые молекулы?

2. На чем основан выбор структуры белка-мишени для моделирования?

3. Приведите примеры алгоритмов выравнивания белковых молекул?

4. Понятие моделирования по гомологии. Как выбирается шаблон для моделирования?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;

- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Выравнивание белковых молекул" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Выравнивание белковых молекул":

1. На чем основан выбор структуры белка-мишени для моделирования?

2. Приведите примеры алгоритмов выравнивания белковых молекул?

3. Понятие моделирования по гомологии. Как выбирается шаблон для моделирования?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;

- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.5. Моделирование по гомологии.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Моделирование по гомологии" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Моделирование по гомологии":

1. Перечислите элементы вторичной структуры белковых молекул. Как по ним можно классифицировать белковые молекулы?

2. На чем основан выбор структуры белка-мишени для моделирования?

3. Приведите примеры алгоритмов выравнивания белковых молекул?

4. Понятие моделирования по гомологии. Как выбирается шаблон для моделирования?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
 - грамотность и связность изложения ответов на вопросы.
- Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.6. Молекулярный докинг.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Молекулярный докинг" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в ЭИОС:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Молекулярный докинг":

1. Какие базы данных для получения информации о белковых мишенях вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
2. Какие базы данных для получения информации о малых молекулах вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
3. Понятие моделирования по гомологии. Как выбирается шаблон для моделирования?
4. Определение молекулярного докинга. Понятие скоринг-функции.

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.7. Молекулярная динамика.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопрос преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Молекулярная динамика" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в ЭИОС:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Молекулярная динамика":

1. Какие базы данных для получения информации о белковых мишенях вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
2. Какие базы данных для получения информации о малых молекулах вы знаете? В каких форматах хранятся эти данные?
3. Определение молекулярной динамики. Какие параметры используются для оценки траектории молекулярной динамики?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени.

Форма контроля/оценочное средство: Кейс-задача

Вопросы/Задания:

1. Проанализируйте комплекс «белок-лиганд», выданный из списка, и подготовьте отчет, ответив на вопросы и прикрепив иллюстрации.

Представляет собой задачу по анализу комплекса «белок-лиганд», выданного из списка.

Список кейс-задач (ситуационных задач):

PDB ID Название комплекса

1DB1 «Crystal structure of the nuclear receptor for vitamin D complexed to vitamin D»

2ZNP «Human PPAR delta ligand binding domain in complex with a synthetic agonist TIPP204»

6WWB «Crystal Structure of the second bromodomain of human BRD2 in complex with the compound 3b»

7APT «The Fk1 domain of FKBP51 in complex with ((1S,5S,6R)-10-((3,5-dichlorophenyl)sulfonyl)-2-oxo-5-vinyl-3,10-diazabicyclo[4.3.1]decan-3-yl)acetic acid»

7N03 «Crystal structure of MTH1 in complex with compound 31».

Выполняется студентом индивидуально. Необходимо выполнить последовательно:

1. Загрузите структуру белка-мишени в PyMOL или Maestro. 2. Визуализируйте вторичную структуру белка (cartoon). 3. Изучите элементы вторичной структуры и подберите цвета для каждого из них – к какому классу относится этот белок? Каким методом была получена кристаллическая структура белка? Какие компоненты есть в PDB-файле? Какие функции выполняет данный белок? 4. Приведите его классификацию согласно базе CATH. 5. Постройте карту Рамачандрана – какие выводы можно сделать? 6. Визуализируйте лиганд (ballsandsticks). Выясните механизм связывания этого лиганда с белком, изучив статью, прикрепленную к записи о данной структуре в PDB.

Критериями оценивания являются:

- наличие/отсутствие ошибок в ходе выполнения задачи;

- достижение цели выполнения задачи.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.

Форма контроля/оценочное средство: Кейс-задача

Вопросы/Задания:

1. Выполните молекулярный докинг и подготовьте отчет, ответив на вопросы и прикрепив иллюстрации.

Представляет собой задачу по анализу комплекса «белок-лиганд», выданного из списка.

Список кейс-задач (ситуационных задач):

PDB ID Название комплекса

1DB1 «Crystal structure of the nuclear receptor for vitamin D complexed to vitamin D»

2ZNP «Human PPAR delta ligand binding domain in complex with a synthetic agonist TIPP204»

6WWB «Crystal Structure of the second bromodomain of human BRD2 in complex with the compound 3b»

7APT «The Fk1 domain of FKBP51 in complex with ((1S,5S,6R)-10-((3,5-dichlorophenyl)sulfonyl)-2-oxo-5-vinyl-3,10-diazabicyclo[4.3.1]decan-3-yl)acetic acid»

7N03 «Crystal structure of MTH1 in complex with compound 31»

Выполняется студентом индивидуально в ходе практического занятия. Необходимо выполнить последовательно:

1. Для заданного комплекса «белок-лиганд» проведите подготовку структуры на предмет недостающих атомов водорода, исследуйте пропущенные участки. Затрагивают ли они сайт связывания? 2. Проведите процедуру редокинга, чтобы валидировать модель. 3. Проведите докинг ранее найденных структурных аналогов в активный сайт данного белка. 4. Объясните результаты – опишите конформации и возможный механизм взаимодействия.

Критериями оценивания являются:

- наличие/отсутствие ошибок в ходе выполнения задачи;
- достижение цели выполнения задачи

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования.

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Компьютерное представление химических соединений" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Компьютерное представление химических соединений":

1. Какие способы компьютерного представления химических соединений вы знаете?
2. Понятие молекулярного дескриптора. Приведите примеры.
3. Какие библиотеки для работы с химическими данными вы знаете? Примеры задач, которые можно выполнять с их помощью.

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Понятие дескриптора, их виды" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Понятие дескриптора, их виды":

1. Какие способы компьютерного представления химических соединений вы знаете?
2. Понятие молекулярного дескриптора. Приведите примеры.
3. Какие библиотеки для работы с химическими данными вы знаете? Примеры задач, которые можно выполнять с их помощью.

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в ЭИОС: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными":

1. Какие способы компьютерного представления химических соединений вы знаете?
2. Понятие молекулярного дескриптора. Приведите примеры.
3. Какие библиотеки для работы с химическими данными вы знаете? Примеры задач, которые можно выполнять с их помощью.
4. Понятия SAR / QSAR / QSPR, в чем различия между ними?
5. Какие основные методы классического машинного обучения вы знаете? Отличия задачи классификации от задачи регрессии. Приведите примеры вопросов в поиске веществ с заданными свойствами, которые можно решать с помощью каждой из задач.

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "SAR/QSAR/QSPR" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в ЭИОС:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "SAR/QSAR/QSPR":

1. Какие способы компьютерного представления химических соединений вы знаете?
2. Понятие молекулярного дескриптора. Приведите примеры.
3. Какие библиотеки для работы с химическими данными вы знаете? Примеры задач, которые можно выполнять с их помощью.
4. Понятия SAR / QSAR / QSPR, в чем различия между ними?
5. Какие основные методы классического машинного обучения вы знаете? Отличия задачи классификации от задачи регрессии. Приведите примеры вопросов в поиске веществ с заданными свойствами, которые можно решать с помощью каждой из задач.

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 3.5. Основы машинного обучения.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе лабораторного занятия.

Для оценки знаний по теме "Основы машинного обучения" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в ЭИОС:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3491>.

Перечень примерных вопросов по теме "Основы машинного обучения":

1. Какие способы компьютерного представления химических соединений вы знаете?
 2. Понятие молекулярного дескриптора. Приведите примеры.
 3. Какие библиотеки для работы с химическими данными вы знаете? Примеры задач, которые можно выполнять с их помощью.
 4. Понятия SAR / QSAR / QSPR, в чем различия между ними?
 5. Какие основные методы классического машинного обучения вы знаете? Отличия задачи классификации от задачи регрессии. Приведите примеры вопросов в поиске веществ с заданными свойствами, которые можно решать с помощью каждой из задач.
- Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.
- Критериями оценивания являются:
- степень усвоения понятий и категорий по теме;
 - грамотность и связность изложения ответов на вопросы.
- Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.

Форма контроля/оценочное средство: Кейс-задача

Вопросы/Задания:

1. Осуществите поиск структурных аналогов лиганда из выданного вам комплекса «белок-лиганд», предскажите их свойства и тип активности, и подготовьте отчет, ответив на вопросы и прикрепив иллюстрации.

Представляет собой задачу по анализу комплекса «белок-лиганд», выданного из списка.

Список кейс-задач (ситуационных задач):

PDB ID Название комплекса

1DB1 «Crystal structure of the nuclear receptor for vitamin D complexed to vitamin D»

2ZNP «Human PPAR delta ligand binding domain in complex with a synthetic agonist TIPP204»

6WWB «Crystal Structure of the second bromodomain of human BRD2 in complex with the compound 3b»

7APT «The Fk1 domain of FKBP51 in complex with ((1S,5S,6R)-10-((3,5-dichlorophenyl)sulfonyl)-2-oxo-5-vinyl-3,10-diazabicyclo[4.3.1]decan-3-yl)acetic acid»

7N03 «Crystal structure of MTH1 in complex with compound 31»

Выполняется студентом индивидуально в ходе практического занятия. Необходимо последовательно выполнить:

1. Найдите лиганд в базе данных PubChem, проведите поиск по подобию и по подструктуре, скачайте топ-10 поисковой выдачи. Есть ли данные об активности для этих лигандов в базе ChEMBL? 2. Исследуйте зависимость между активностью и физико-химическими свойствами лиганда с помощью scatter-plots. 3. Подумайте, какие еще дескрипторы можно использовать (например, число определенных функциональных групп), и исследуйте также зависимость активности от них. Удалось ли вам найти свойства, по которым можно построить регрессионную модель для предсказания активности? 4. Предскажите возможные типы активности в PASSOnline.

Критериями оценивания являются:

- наличие/отсутствие ошибок в ходе выполнения задачи;

- достижение цели выполнения задачи

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

4. Оценочные материалы промежуточной аттестации

Второй семестр, Экзамен

Вопросы/Задания:

1. Подготовить письменный ответ на вопрос категории 1 о методах молекулярного моделирования и ответить на уточняющие устные вопросы преподавателя по данному вопросу.

Вопросы категории 1:

1. Методы молекулярного моделирования – классификация и примеры.
2. Методы молекулярного моделирования, основанные на структуре мишени.
3. Методы молекулярного моделирования, основанные на структуре мишени лиганда.
4. Базы данных для поиска химической и биологической информации. Примеры использования в молекулярном моделировании. Форматы файлов.
5. Структура белковых молекул. Классификация на основе вторичной структуры.
6. Алгоритмы выравнивания белковых молекул.
7. Моделирование по гомологии (определение, цель, описание процедуры, анализ результатов)
8. Молекулярный докинг (определение, цель, описание процедуры, анализ результатов).
9. Молекулярная динамика (определение, цель, описание процедуры, анализ результатов).

2. Подготовить письменный ответ на вопрос категории 2 о QSAR-моделировании и работе с химической информацией и ответить на уточняющие устные вопросы преподавателя по данному вопросу.

Вопросы категории 2:

1. Компьютерное представление химических соединений, примеры.
2. Молекулярные дескрипторы, примеры.
3. Библиотеки для работы с химическими данными, примеры использования.
4. SAR(определение, цель, виды, описание процедуры, анализ результатов).
5. Машинное обучение: суть задачи, примеры простейших задач (классификация, регрессия).