

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

Научно-образовательный центр физико-математических наук и цифровых технологий

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
«Б1.В.08 КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН МОЛЕКУЛ»**

Уровень высшего образования: магистратура

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки: Медицинская химия и дизайн молекул

Квалификация (степень) выпускника: магистр

Форма обучения: очная

Год набора (приема на обучение) 2024

Срок получения образования: 2 года

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

2024

Разработчики:

Доцент, кафедра научно-образовательный центр физико-математических наук и цифровых технологий, кандидат биологических наук Бабенко А. Ю.

Директор научно-образовательного центра, кафедра научно-образовательный центр физико-математических наук и цифровых технологий, кандидат химических наук Панов М. С.

Рабочая программа дисциплины (модуля) составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки Направление подготовки: 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 №655, с учетом трудовых функций профессиональных стандартов: "Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам", утвержден приказом Минтруда России от 04.03.2014 № 121н.

Согласование и утверждение

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	Методическая комиссия УГСН 04.00.00	Председатель методической комиссии/совета	Алексеева Г. М.	Согласовано	28.05.2024 №5
2		Ответственный за образовательную программу	Федорова Е. В.	Согласовано	28.05.2024

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 Е. В.	Согласовано	28.05.2024 №8

Содержание (рабочая программа)

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины в структуре ОП
3. Объем дисциплины и виды учебной работы
4. Содержание дисциплины
 - 4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий
 - 4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля
5. Порядок проведения промежуточной аттестации
6. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины
 - 6.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы
 - 6.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся
 - 6.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине
 - 6.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование
7. Методические указания по освоению дисциплины (модуля)

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

Компетенции, индикаторы и результаты обучения

ПК-2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью

ПК-2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью

Знать:

ПК-2.1/Зн1 Знать принципы связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью.

Уметь:

ПК-2.1/Ум1 Уметь применять методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью

ПК-2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности

Знать:

ПК-2.2/Зн1 Знать методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры органического вещества и биологической активности

Уметь:

ПК-2.2/Ум1 Уметь проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ, базируясь на данных QSAR-моделирования

2. Место дисциплины в структуре ОП

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

Освоение компетенций начинается с изучения текущей дисциплины.

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.09 Медицинская химия;

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

Б2.В.01(П) 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

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

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий (часы промежуточной аттестации не указываются)

Наименование раздела, темы	Всего	Консультации в период	Консультации в период теоретического	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа студента	Планируемые результаты обучения, соотнесенные с

		сессии	еского обучения			результатами освоения программы
Раздел 1. Основы молекулярного моделирования.	104,5		4	36	64,5	ПК-2.1 ПК-2.2
Тема 1.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).	8,5			4	4,5	
Тема 1.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).	8,5			4	4,5	
Тема 1.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).	8,5			4	4,5	
Тема 1.4. Выравнивание белковых молекул.	8,5			4	4,5	
Тема 1.5. Моделирование по гомологии.	8,5			4	4,5	
Тема 1.6. Молекулярный докинг.	8,5			4	4,5	
Тема 1.7. Молекулярная динамика.	8,5			4	4,5	
Тема 1.8. Структура и функции белка-мишени.	22,5		2	4	16,5	
Тема 1.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.	22,5		2	4	16,5	
Раздел 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул	10,5	1	1	4	4,5	ПК-2.1 ПК-2.2
Тема 2.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.	10,5	1	1	4	4,5	
Раздел 3. Основы QSAR-моделирования.	67	1	3	24	39	ПК-2.1 ПК-2.2
Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.	9,5		1	4	4,5	
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	1		4	4,5	
Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.	22,5		2	4	16,5	
Итого	182	2	8	64	108	

4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

Раздел 1. Основы молекулярного моделирования.

(Консультации в период теоретического обучения - 4ч.; Лабораторные занятия - 36ч.; Самостоятельная работа студента - 64,5ч.)

Тема 1.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF). Работа с базами PDB, PubChem.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

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

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.4. Выравнивание белковых молекул.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Выравнивание белковых молекул. Работа в PyMOL и MaestroAcademic.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.5. Моделирование по гомологии.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Моделирование по гомологии. Работа с сервисом SWISS-MODEL.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.6. Молекулярный докинг.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Молекулярный докинг. Работа с AutodockVina.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.7. Молекулярная динамика.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Молекулярная динамика. Работа с GROMACS.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Собеседование

Тема 1.8. Структура и функции белка-мишени.

(Консультации в период теоретического обучения - 2ч.; Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 16,5ч.)

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

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Кейс-задача

Тема 1.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.
(Консультации в период теоретического обучения - 2ч.; Лабораторные занятия - 4ч.;
Самостоятельная работа студента - 16,5ч.)

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

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Кейс-задача

Раздел 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул
(Консультации в период сессии - 1ч.; Консультации в период теоретического обучения - 1ч.;
Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Тема 2.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

(Консультации в период сессии - 1ч.; Консультации в период теоретического обучения - 1ч.;
Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

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

Вид (форма) контроля

Собеседование

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования.

(Консультации в период сессии - 1ч.; Консультации в период теоретического обучения - 3ч.;
Лабораторные занятия - 24ч.; Самостоятельная работа студента - 39ч.)

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.

(Консультации в период теоретического обучения - 1ч.; Лабораторные занятия - 4ч.;
Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Компьютерное представление химических соединений.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Собеседование

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Понятие дескриптора, их виды.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Собеседование

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

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа в PyMOL и MaestroAcademic.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Собеседование

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.

(Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

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

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Собеседование

Тема 3.5. Основы машинного обучения.

(Консультации в период сессии - 1ч.; Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 4,5ч.)

Основы машинного обучения. Работа с scikit-learn.

Текущий контроль

Вид (форма) контроля

Собеседование

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.

(Консультации в период теоретического обучения - 2ч.; Лабораторные занятия - 4ч.; Самостоятельная работа студента - 16,5ч.)

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

Текущий контроль

Вид (форма) контроля
Кейс-задача
Тест

4.3. Содержание занятий семинарского типа.

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

Раздел 1. Основы молекулярного моделирования.

Тема 1.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Тема 1.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Тема 1.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Тема 1.4. Выравнивание белковых молекул.

Тема 1.5. Моделирование по гомологии.

Тема 1.6. Молекулярный докинг.

Тема 1.7. Молекулярная динамика.

Тема 1.8. Структура и функции белка-мишени.

Тема 1.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.

Раздел 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (1 ч.)

Тема 2.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул

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

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.

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.

4.4. Содержание занятий семинарского типа.

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

Раздел 1. Основы молекулярного моделирования. (4 ч.)

Тема 1.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Тема 1.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Тема 1.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Тема 1.4. Выравнивание белковых молекул.

Тема 1.5. Моделирование по гомологии.

Тема 1.6. Молекулярный докинг.

Тема 1.7. Молекулярная динамика.

Тема 1.8. Структура и функции белка-мишени.

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

Тема 1.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.

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

Раздел 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (1 ч.)

Тема 2.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

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

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

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.

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.

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

4.5. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Лабораторные занятия (64 ч.)

Раздел 1. Основы молекулярного моделирования. (36 ч.)

Тема 1.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней). (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия "Основы молекулярного моделирования".

Тема 1.2. 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 1.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа в PyMOL и MaestroAcademic.

Тема 1.4. Выравнивание белковых молекул. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с сервисами EMBL-EBI, KRAV.

Тема 1.5. Моделирование по гомологии. (4 ч.)

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

Тема 1.6. Молекулярный докинг. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с Autodock Vina.

Тема 1.7. Молекулярная динамика. (4 ч.)

Обсуждение по теме занятия, работа с GROMACS.

Тема 1.8. Структура и функции белка-мишени. (4 ч.)

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

Тема 1.9. 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 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (4 ч.)

Тема 2.1. 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 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.

4.6. Содержание самостоятельной работы обучающихся

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

Раздел 1. Основы молекулярного моделирования. (64,5 ч.)

Тема 1.1. 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 1.2. 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 1.3. 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 1.4. 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 1.5. 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 1.6. 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 1.7. 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 1.8. 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).

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

Тема 1.9. 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).

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

Раздел 2. Введение, основные подходы к компьютерному дизайну молекул (4,5 ч.)

Тема 2.1. 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 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 утвержденных 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 «неудовлетворительно». В случае сформированности всех вынесенных на промежуточную аттестацию компетенций оценивание проводится по следующим критериям:

- степень усвоения понятий и категорий по теме: знает принципы связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью и методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры органического вещества и биологической активности

- умение работать с предоставленными спектральными данными, применять методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью;

- 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 «неудовлетворительно».

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. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. - Москва: Лаборатория знаний, 2020. - 322 с. - 978-5-00101-724-0. - Текст: непосредственный.

Дополнительная литература

1. Диченко,, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко,. - Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул - Минск: Белорусская наука, 2023. - 138 с. - 978-985-08-2970-2. - Текст: электронный. // IPR SMART: [сайт]. - URL: <https://www.iprbookshop.ru/132017.html> (дата обращения: 14.09.2024). - Режим доступа: по подписке

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://qsardb.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.

Оборудование общего назначения:

Презентационное оборудование (мультимедиа-проектор, экран, компьютер для управления) - для проведения лекционных и семинарских занятий.

Компьютерный класс (с выходом в Internet) - для организации самостоятельной работы обучающихся.

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 плоскочечного текста;

Радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» РМ-6-1 (заушный индиктор) - портативная звуковая FM-система для обучающихся с нарушением слуха, улучшающая восприятие голосовой информации.

7. Методические указания по освоению дисциплины (модуля)

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.

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.

Тест

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой систему стандартизированных заданий, позволяющую автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: спецификация банка тестовых заданий