

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 24 » мая 2022 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах»**

Направление подготовки  
04.03.01 Химия

Направленность (профиль)  
«Медицинская и фармацевтическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании института  
от 14 апреля 2022 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК  
факультета биологии и экологии  
протокол № 8 от 18 апреля 2022 г.

Ярославль

## **1. Цели освоения дисциплины**

Целью изучения дисциплины «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах» является формирование у студентов знаний об основных подходах и методах, использующихся для моделирования взаимодействий молекулярных систем различных уровней (от низкомолекулярных до высокомолекулярных), предсказания свойств будущих соединений, оптимизации процесса отбора будущих веществ-кандидатов.

Курс формирует у студентов современные представления о взаимосвязи строения и биологической активности химических соединений, о роли супрамолекулярных взаимодействий в ферментативных реакциях, процессах репликации, биосинтеза, детоксикации и пр.

## **2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах» относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1, и является дисциплиной по выбору. Шифр в соответствии с учебным планом Б1.В.ДВ.05.01.

Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах» направлено на формирование у студентов знаний об основных подходах и методах, использующихся для моделирования взаимодействий молекулярных систем различных уровней (от низкомолекулярных до высокомолекулярных), предсказания свойств будущих соединений, оптимизации процесса отбора будущих веществ-кандидатов.

В курсе рассматриваются в том числе вопросы биоинформатики как междисциплинарной области, объединяющей молекулярную биологию, кибернетику, генетику, химию, компьютерные науки, математику и статистику

В рамках изучения данного курса студенты приобретают представления:

- о методах статистического моделирования и методах, основанных на эмпирических потенциалах.
- об основных методах квантовой химии - неэмпирических, полуэмпирических и т.д.
- о методах работы с системами биологической природы.
- о принципах рассмотрения некоторых особых объектах, таких как биологические системы.
- о супрамолекулярных взаимодействиях.
- о предсказании структуры и свойств соединений в том числе биологической природы.

В рамках освоения дисциплины предусмотрено как теоретическое изучение различных компьютерных программ и методов для моделирования химических соединений, так и практическая часть, включающая занятия по моделированию химических структур различной сложности и их взаимодействий с использованием персональных компьютеров и специализированного программного обеспечения

Результатом освоения дисциплины является приобретение необходимых профессиональных знаний и навыков, лежащих в основе использования методов компьютерного моделирования соединений, в том числе биологической природы.

Итоговой формой контроля по дисциплине является зачет.

Исходные требования, предъявляемые к студентам:

- знание основ органической химии,
- знание основ биохимии и молекулярной биологии,
- владение основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, в программах Microsoft Word, Microsoft Excel (для составления графиков и диаграмм),
- опыт работы с молекулярными редакторами ChemSketch, MarvinSketch, ISIS Draw и т.д.

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

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретение следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Профессиональные компетенции</b>		
<b>ПК-1</b> Способен проводить НИР и НИОКР, выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.	<b>ПК-1.1</b> Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.	<b>Знать:</b> – основные этапы компьютерного эксперимента. <b>Уметь:</b> – планировать компьютерный эксперимент. <b>Владеть навыками:</b> – работы с программным обеспечением, реализующим моделирование и дизайн молекулярных систем, предсказание биологической активности.
	<b>ПК-1.2</b> Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР.	<b>Знать</b> – перечень документации, необходимой для подготовки планов и программ отдельных этапов НИР. <b>Уметь:</b> – оформлять протоколы эксперимента. <b>Владеть навыками:</b> – работы с документами, проектами планов и программ отдельных этапов НИР.
	<b>ПК-1.3</b> Выбирает технические средства реализации и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.	<b>Знать:</b> – основные методические подходы при дизайне химических соединений и биологических систем, их возможности, преимущества и недостатки; – теоретические основы фармакофорной модели. <b>Уметь:</b> – подбирать необходимые средства реализации дизайна низкомолекулярных химических структур, сложных биологических систем. <b>Владеть навыками:</b> – Работы с программами компьютерного моделирования.
	<b>ПК-1.4</b> Готовит объекты исследования.	<b>Знать:</b> – современные подходы к подготовке моделей. <b>Уметь:</b> – учитывать особенности программ для компьютерного моделирования при создании и оптимизации молекулярных моделей; – находить информацию о химических соединениях в информационных базах данных.

		<p><b>Владеть навыками:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– создания молекулярных моделей;</li> <li>– оценки соответствия исходной модели реальному объекту;</li> <li>– оптимизации и верификации молекулярных моделей.</li> </ul>
<p><b>ПК-2</b> Способен осуществлять разработку методов получения и контроля соединений с целевыми характеристиками под руководством специалиста более высокой квалификации.</p>	<p><b>ПК-2.1</b> Способен проектировать направленный синтез органических соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи.</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– теоретические основы органической химии и молекулярной биологии;</li> <li>– основные механизмы межмолекулярных взаимодействий.</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– планировать направленный синтез химических структур;</li> <li>– оценивать реакционную способность химических соединений.</li> </ul> <p><b>Владеть навыками:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– составления схем синтеза;</li> <li>– предсказания свойств получаемых соединений, в том числе оценкой биологической активности.</li> </ul>
	<p><b>ПК-2.4</b> Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов.</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– зависимости реакционной способности соединений от их химической структуры и условий реализации химических реакций.</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– оценивать пути протекания химических реакций, в том числе с применением методов компьютерного моделирования;</li> <li>– оценивать реакционную способность химических соединений.</li> </ul> <p><b>Владеть навыками:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– определения преимущественного протекания контроля химических реакций (зарядовый, орбитальный);</li> <li>– оценки реакционной способности через зарядовый и орбитальный контроль реакций.</li> </ul>
	<p><b>ПК-2.5</b> Способен оценивать прогнозировать целевые свойства на основе фундаментальных основ их формирования.</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– зависимости физических и химических свойств от структуры соединений;</li> <li>– зависимости биологической активности соединений от значений молекулярных дескрипторов (LogP, молекулярная рефракция, стерические константы Тафта и т.д.).</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– прогнозировать целевые свойства соединений на основе фундаментальных основ их формирования.</li> </ul> <p><b>Владеть навыками:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– оценки и прогноза целевых свойств для требуемых структур.</li> </ul>

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 acad.ch.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)					самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости  Форма промежуточной аттестации (по семестрам)  Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания		
1	Введение. Основы компьютерного моделирования в химии и биологии. Моделирование и модели.	8	4		2			2	Тест. Отчет о лабораторной работе
2	Основы биоинформатики. Геномика и протеомика.	8	6		6	1		6	Тест. Отчет о лабораторной работе
3	Супрамолекулярные взаимодействия и молекулярный дизайн взаимодействующих систем. Фармакофорная модель взаимодействий.	8	4		4	2		5	Тест. Отчет о лабораторной работе
4	Методы QSAR и молекулярного докинга, как подходы предсказания свойств и дизайна супрамолекулярных взаимодействий.	8	4		6	2		6	Тест. Отчет о лабораторной работе
						2	0,3	9,7	Зачёт
	<b>ИТОГО</b>		<b>18</b>		<b>18</b>	<b>7</b>	<b>0,3</b>	<b>28,7</b>	

#### 4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

##### Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Введение. Основы компьютерного моделирования в химии и биологии. Моделирование и модели	8			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Основы биоинформатики. Геномика и протеомика	8			2				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Супрамолекулярные взаимодействия и молекулярный дизайн взаимодействующих систем. Фармакофорная модель взаимодействий	8			6				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Методы QSAR и молекулярного докинга, как подходы предсказания свойств и дизайна супрамолекулярных взаимодействий	8			2				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	<b>ИТОГО</b>				<b>18</b>				

#### Содержание разделов дисциплины

##### 1. Введение. Основы компьютерного моделирования в химии и биологии. Моделирование и модели.

- 1.1. Модели и моделирование. Функции моделей, классификация моделей.
- 1.2. Планирование и постановка компьютерного эксперимента.
- 1.3. Прямая и обратная задачи компьютерного моделирования.
- 1.4. Описание частных задач компьютерного моделирования. Построение и верификация моделей.
- 1.5. Основные методы компьютерного моделирования в химии и биологии.

##### 2. Основы биоинформатики. Геномика и протеомика.

- 2.1. Особенности моделирования малых и больших молекул
- 2.2. Биоинформатика: определение, задачи, методы.
- 2.3. Биоинформационные базы данных.
- 2.4. Структурная и сравнительная геномика. Методы сравнения первичных структур молекул биополимеров. Алгоритмы сравнения.

2.5. Протеомика. Пространственная структура белков. Методы предсказания пространственных структур белков. Механизмы формирования пространственных структур биологических макромолекул. Банки белковых структур. Компьютерное моделирование взаимодействия биологических молекул.

### **3. Супрамолекулярные взаимодействия и молекулярный дизайн взаимодействующих систем. Фармакофорная модель взаимодействий.**

3.1. Примеры супрамолекулярных систем химического и биологического уровней.

3.2. Принципы супрамолекулярной химии.

3.3. Супрамолекулярные взаимодействия.

3.4. Механизмы молекулярного узнавания.

3.5. Типы молекулярных мишеней.

3.6. Фармакофорная модель как основа моделирования супрамолекулярных систем.

3.7. Мишень и лекарство, субстрат и фермент как супрамолекулярные системы.

### **4. Методы QSAR и молекулярного докинга, как подходы предсказания свойств и дизайна супрамолекулярных взаимодействий.**

4.1. Метод QSAR: определение, задачи.

4.2. Этапы проведения QSAR.

4.3. Виды молекулярных дескрипторов и принципы их отбора.

4.4. Способы валидации QSAR-модели.

4.5. Молекулярный докинг и его задачи.

4.6. Жесткий и гибкий докинг.

4.7. Алгоритмы докинга и поиска оценочной функции.

## **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

**Вводная лекция** – предназначена для начального ознакомления студентов с изучаемой дисциплиной, целями и задачами курса. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках изучения данной дисциплины, а также предлагается обзор рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (лекция общего курса) – последовательное изложение учебного материала в соответствии с темой занятия. Как правило, проводится в виде доклада, сопровождаемого иллюстрированной презентацией, содержащей информативную часть, примеры и пояснения к изучаемому материалу.

**Лабораторное занятие** – занятие, посвященное практическому освоению методов компьютерного моделирования.

**Консультации** – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

**Электронный учебный курс «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах»** в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- осуществляется проведение отдельных мероприятий текущего контроля успеваемости студентов;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлены правила прохождения промежуточной аттестации по дисциплине;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в режиме онлайн;

- представлена информация о формах синхронного и асинхронного взаимодействий между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

#### **6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- офисный пакет приложений Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome;
- химический редактор ChemSketch или его аналог;
- МОРАС2012 (академическое некоммерческое использование бесплатно), Jmol (GPL), Avogadro (Open Source), EMBOSS (GNU GPL), Firefly.

#### **7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)**

В процессе осуществления образовательного процесса по дисциплине используются:

- автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)
- база данных генов и геномов GenBank <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/genbank/> (поиск заданных нуклеотидных и аминокислотных последовательностей);
- база данных Protein Data Bank (PDB) <http://www.rcsb.org/pdb/> (получение трехмерных структур белков и биологических макромолекул);
- онлайн-сервис Basic Local Alignment Search Tool (BLAST) <http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi> (поиск сходных последовательностей и локального выравнивания);
- онлайн-сервис Multiple sequence alignment (MSA) <http://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/> (множественное выравнивание нескольких последовательностей);
- онлайн-сервис ScanProsite <http://ca.expasy.org/tools/scanprosite/> (сканирование последовательностей, поиск мотивов и паттернов);
- база данных ChemSpider <http://www.chemspider.com/> (поиск свойств химических структур).
- <http://genome.ucsc.edu/> База геномных последовательностей.
- [http://web.expasy.org/docs/swiss-prot\\_guideline.html](http://web.expasy.org/docs/swiss-prot_guideline.html) База данных белковых последовательностей.
- <http://enzyme.expasy.org/> База данных последовательностей ферментов.
- <http://prosite.expasy.org/> База данных белковых доменов, семейств и активных центров ферментов.
- <http://pir.georgetown.edu/> Интегрированный общественный биоинформационный ресурс для поддержки исследований и научных исследований в области геномной, протеомной и системной биологии
- <http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop/> База структурной классификации белков.
- <http://www.genome.jp/kegg> Киотская база данных генов и геномов



## **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Ризниченко, Г.Ю. Математическое моделирование биологических процессов. Модели в биофизике и экологии : учебное пособие для вузов / Г.Ю. Ризниченко. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 181 с.

<https://urait.ru/bcode/470480>

### **б) дополнительная литература**

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: 2-е издание. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012. – 496 с.

[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1274957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1274957&cat_cd=YARSU)

2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 383 с.

[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1219858&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1219858&cat_cd=YARSU)

### **в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)**

1. Введение в хемоинформатику: Компьютерное представление химических структур: учеб. пособие / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 176 с.

[https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfxNnSrvdTwhgmXb-nFvTqSkTu-I5EOH\\_5sVQjgRtReFXfRg/viewform](https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfxNnSrvdTwhgmXb-nFvTqSkTu-I5EOH_5sVQjgRtReFXfRg/viewform)

2. Группа VK «Институт биоинформатики» <https://vk.com/bioinf>

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций,
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

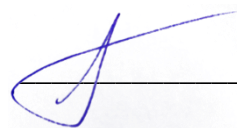
Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для лабораторных работ – списочному составу группы обучающихся.

Автор:

Доцент института  
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.



Лебедев А.С.

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в  
биологических системах»**

**Фонд оценочных средств  
для проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации студентов  
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Типовые примеры заданий при проведении тестирований**

**Тестирование по темам 1-2**

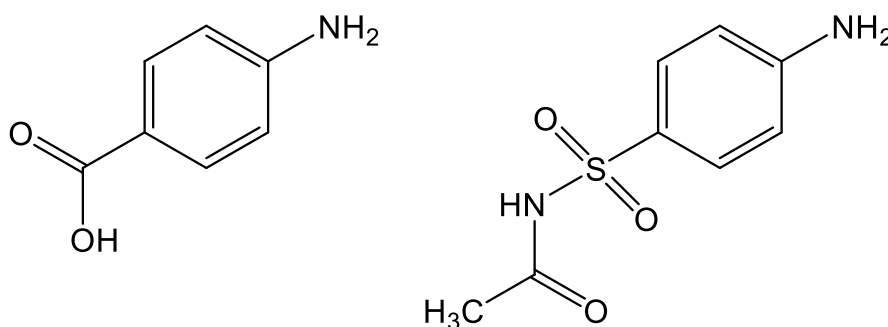
1. Моделирование и исследование биологических макромолекул с применением компьютерных технологий относится к исследованиям...
  - A. in vitro
  - Б. in vivo
  - В. in situ
  - Г. in silico
  
2. Последовательности в биоинформатике соотносят с...
  - A. Белками
  - Б. Нуклеиновыми кислотами
  - В. Углеводами
  - Г. Липидами
  
3. Для представления последовательностей используется формат...
  - A. FASTA
  - Б. SMILES
  - В. MOL
  - Г. PDB
  
4. Для формата FASTA обязательна пропись названия последовательности, если в файле содержится только одна последовательность. Верно ли данное утверждение?
  - A. Верно
  - Б. Неверно
  
5. Перед сравнением последовательностей требуется провести их...
  - A. Выравнивание
  - Б. Оптимизацию
  - В. Секвенирование
  - Г. Вычитание
  - Д. Нормализацию
  
6. Разрыв последовательности по другому называется...
  - A. Gap
  - Б. Cap
  - В. Swap
  - Г. UAG

7. Область молекулярной биологии, посвященная идентификации и количественному анализу белков называется...

- А. Протеомика
- Б. Геномика
- В. Кибернетика
- Г. Метаболомика

### Тестирование по темам 3-4

1. Какая концепция дизайна лекарств более применима к данным соединениям?



- А. Модификация действующего фрагмента
- Б. Удаление лишнего
- В. Биоизостеризм

2. Синонимом для термина «дескриптор» является...

- А. Отклик
- Б. Биологическая активность
- В. Предиктор
- Г. Критерий

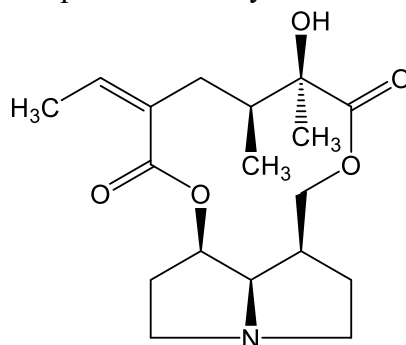
3. К биологической активности вещества в методе QSAR чаще всего относят...

- А. Токсические эффекты
- Б. Дозировку/концентрацию
- В. Фармакокинетику
- Г. Механизм биологического действия

4. Показатель RMSEC оценивает качество ...

- А. Обучения модели +
- Б. Тест-валидации
- В. Кросс-валидации
- Г. Предсказания реальных образцов

5. Укажите число акцепторов водородной связи у данного соединения.



6. Укажите высказывания, относящиеся к правилам RO5:

А. Площадь полярной поверхности молекулы составляет не более  $140 \text{ \AA}^2$

Б. Не более 10 свободновращающихся связей

В. Не более 10 акцепторов водородной связи

Г. Параметр гидрофобности LogP не превышает 5

#### **Правила выставления оценки по результатам тестирования**

- *Отлично* выставляется за 85% правильных ответов и более.
- *Хорошо* выставляется за 65% правильных ответов и более.
- *Удовлетворительно* выставляется за 50% правильных ответов и более.
- *Неудовлетворительно* выставляется при наличии менее 50% правильных ответов или при отказе обучающегося пройти тестовый контроль.

#### **Защита лабораторных работ**

Защита лабораторных работ проходит в формате общения с преподавателем по результатам проведенных лабораторных работ и оценивается по двухбалльной системе: «зачтено» или «незачтено».

Критерии оценки защиты лабораторной работы студента:

Зачтено: студент уверенно отвечает на все поставленные преподавателем вопросы. Лабораторная работа надлежащим образом оформлена в рабочем журнале, а выводы соответствуют поставленным задачам. По окончании оценивания в рабочем журнале выставляется соответствующая отметка в виде росписи преподавателя.

Не зачтено: дано неправильное или же, в значительной степени, неполное раскрытие поставленных вопросов с серьезными пробелами и сбоями в логике изложения материала, некорректное оформление или отсутствие оформленной лабораторной работы в рабочем журнале, некорректно сделанные выводы.

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

## **2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

### **Список вопросов к зачету**

1. Моделирование и модели. Определение, функции, классификация. Компьютерное моделирование и его этапы.
2. Прямая и обратная задачи компьютерного моделирования в хемо- и биоинформатике. Типичный алгоритм проведения КХМ-вычислений.
3. Биоинформатика как область знаний. Задачи биоинформатики. Связь с другими науками.
4. Способы представления химических объектов: линейные, матричные, табличные, трехмерные представления, битовые строки, молекулярные графы.
5. Способы представления последовательностей биологических молекулярных систем.
6. Метод Монте-Карло. Детерминированный хаос. Генерация случайных (псевдослучайных) чисел. Физические (аппаратные), табличные, алгоритмические ГПСЧ.
7. Методы молекулярной и броуновской динамики. Особенности и применение.
8. Методы квантовой химии.
9. Методы машинного обучения.
10. Создание молекулярных моделей: редакторы, основные подходы к созданию моделей. Способы сохранения (способы построения) геометрической конфигурации молекул.

11. Базы данных биоинформатики.
12. Оптимизация геометрии молекулярной системы. Назначение, методы, алгоритмы оптимизации. Верификация оптимизированной модели. Критерии сходимости.
13. Поверхность потенциальной энергии и ключевые точки.
14. Учет влияния сольватации и ее типы. Дискретные и континуальные модели.
15. Дискретные сольватационные модели.
16. Континуальные сольватационные модели.
17. Особенности моделирования больших и малых молекул.
18. Протеомика: определение, задачи, область применения.
19. Механизмы формирования пространственных структур биологических макромолекул.
20. Геномика: определение, задачи, область применения.
21. Выравнивание последовательностей. Задачи выравнивания. Расстояния по Хэммингу и Левинштайну. Матрицы замен.
22. Супрамолекулярные взаимодействия в высокомолекулярных системах. Примеры химических и биологических супрамолекулярных ансамблей.
23. Понятия лиганда и биомишени. Типы биомишеней.
24. Принципы QSAR и молекулярного докинга.
25. Виды молекулярных дескрипторов.
26. Регрессионный анализ как один из инструментов поиска новых лекарств и предсказания фармацевтической активности. Простая и множественная регрессия. Понятия фармакокинетики и фармакодинамики.
27. Прямой и обратный QSAR и QSPR. Типы молекулярных дескрипторов. Понятие биологической активности.
28. Уравнение Ганча. Дескрипторы P,  $\pi$ , MR. Расчет LogP.
29. Этапы проведения QSAR. Понятия тест- и кросс-валидации, их преимущества и недостатки. Принципы отбора молекулярных дескрипторов.
30. QSAR-подходы: понятия 1D, 2D, 3D, 4D, 5D, 6D-QSAR. Основные методы 3D-QSAR.
31. Молекулярный докинг: определение, задачи, варианты реализации. Модель фармакофора.

### Оценка устного ответа на зачете

Устный ответ на зачете оценивается по 2 балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;
- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание студентом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно; - на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

## **Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах»**

### **Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

В рамках изучения курса «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах» предусмотрены лекционные, а также лабораторные занятия.

Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование молекулярных систем и взаимодействия в биологических системах» направления подготовки «Химия», профиля «Медицинская и фармацевтическая химия» направлено на формирование у студентов теоретической базы для понимания принципов компьютерного моделирования в химии и биологии.

Для успешного и полного освоения курса обязательным является посещение всех лекций. Выполнение задач на лабораторных занятиях служит для закрепления изученного лекционного материала и усвоения рассматриваемых тем и разделов.

Самостоятельная работа студентов предполагает работу, аналогичную той, что проводилась на лабораторных занятиях с целью закрепления умений и навыков работы с программным обеспечением.

Для контроля усвоения теоретического материала в течение семестра проводятся мероприятия текущей аттестации. Контроль практических навыков осуществляется при защите лабораторных работ. При необходимости проводятся консультации по вопросам, вызывающим затруднения при изучении материала.

Итоговой формой контроля по данной дисциплине является зачет. Для эффективной подготовки студентам рекомендуется использовать материалы лекций, а также учебную литературу, указанную в разделе 8. Также студентам рекомендуется пользоваться приведенными интернет-сайтами: электронными библиотеками, информационными системами и каталогами образовательных ресурсов.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

Для самостоятельной работы студентов рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной программы.

Также для подбора учебной литературы рекомендуется использовать ряд интернет-ресурсов:

1. [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php) Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.
2. <https://urait.ru/> Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика)
3. <http://window.edu.ru/catalog> Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам": свободный доступ к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.