

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ БИОМЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ
ИМЕНИ В.Н. ОРЕХОВИЧА» (ИБМХ)

«ПРИНЯТО»
на заседании Ученого совета ИБМХ
Протокол № 2 от «18» февраля 2016 г.



«УТВЕРЖДАЮ»
Директор ИБМХ, член-корр. РАН
Лисица А.В.
«19» февраля 2016 г.

ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

ПО ДИСЦИПЛИНЕ

КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ

Направление подготовки: 06.06.01 биологические науки

Уровень образования: высшее образование – подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель – исследователь.

Москва, 2016 г.

1. Содержание дисциплины с указанием формируемых компетенций

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Код контролируемой компетенции или ее части	Наименование оценочного средства
1.	Хемоинформатика. Компьютерное описание химических соединений	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет
2.	Базы данных химических и лекарственных соединений	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет
3.	Анализ связи «структура-свойство»	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет
4.	Взаимодействие белков с низкомолекулярными соединениями	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет
5.	Молекулярное моделирование	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет
6.	Сетевая фармакология	УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Контрольный опрос, итоговый контроль по курсу – дифференцированный зачет

2. Оценочные средства для контроля качества подготовки дисциплины «Компьютерное конструирование лекарств»

Учебный план по дисциплине «Компьютерное конструирование лекарств», разработанный в соответствии с ФГОС высшего образования по направлению подготовки 06.06.01 Биологические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденному приказом Минобрнауки РФ № 871 от 30 июля 2014 г., по направленности (профилю) программы предусматривает контроль знаний в форме дифференцированного зачета с выставлением оценок в пятибалльной или столбалльной системах.

3. Форма текущей, промежуточной и итоговой проверки и оценки знаний

Текущий контроль успеваемости проводится в соответствии с Порядком проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации аспирантов ИБМХ.

Текущий контроль осуществляется на лекциях в форме устного контрольного опроса с целью оценки самостоятельной работы аспирантов.

Итоговый контроль по курсу проводится в форме дифференцированного зачета.

Примеры устного опроса по теме «Компьютерное конструирование лекарств»:

1. Процедура кросс-валидации применяется для:

- 1 отбора дискриминирующих переменных
- 2 оценки точности классификатора при малом объеме выборки
- 3 решения обратной задачи распознавания
- 4 формирования обучающей выборки

Правильно – 2.

2. Уменьшение размерности пространства признаков не используется для:

1. улучшения точности классификации
2. избежания переобучения
3. процедуры кросс-валидации
4. упрощения интерпретации решающего правила

Правильно – 3

3. Формула для оценки чувствительности классификации:

1. TP / TN
2. $(TN+TP) / (TP+TN+FP+FN)$
3. $TP / (TP+FN)$
4. $(TP+FP) / (TN+FN)$

Правильно – 3

4. Имеются данные об уровнях экспрессии 1000 генов для 50 пациентов, принимающих препарат А, и для 50 представителей контрольной группы. Необходимо составить список генов, экспрессирующихся дифференциально. Задачу необходимо решать:

1. методами обучения с учителем
2. методами обучения без учителя
3. методами кластерного анализа
4. методом средней связи

Правильно – 1

5. Методы кластерного анализа используются для:

1. разбиения объектов на однородные группы, когда информация о классах недоступна
2. формирования решающего правила на основе обучающей выборки
3. оценки точности классификации
4. построения ROC-кривой

Правильно – 1

6. Какие основные методы установления пространственных структур макромолекул?

1. рентгеноструктурный анализ и ядерный магнитный резонанс
2. ядерный магнитный резонанс и электронный парамагнитный резонанс
3. рентгеноструктурный анализ и электронный парамагнитный резонанс
4. рентгеноструктурный анализ и масс-спектрометрия

Правильно – 1

7. На каком этапе в основном используются методы молекулярного моделирования?

1. выбор мишеней
2. поиск и оптимизации структуры
3. клинические испытания
4. разработка лекарственной формы

Правильно – 2

8. Модификация структуры лиганда при разработке новых лекарств проводится для:

1. увеличения биодоступности лиганда
2. снижения токсичности соединения
3. увеличения основной активности
4. во всех случаях

Правильно – 4

9. Для поиска новых биологически активных лигандов в молекулярных базах данных используются методы:

1. докинга
2. фармакофорные модели
3. поиск по подобию структуры
4. можно использовать все методы

Правильно – 4

10. Оценочные функции (scoring functions) при докинге используются для:

1. оценки токсичности соединения
2. оценки легкости синтеза
3. оценки энергии взаимодействия лиганда с белком
4. оценки стоимости лекарства

Правильно – 3

11. Мишень для лекарственного препарата в организме - это:

1. молекула альбумина, с которой связывается лекарственный препарат
2. монооксигеназная система цитохромов P450, метаболизирующая лекарственные препараты в организме
3. макромолекула, взаимодействие препарата с которой приводит к возникновению фармакотерапевтического эффекта
4. коллаген – основной белок соединительной ткани в организме

Правильно – 3.

12. В настоящее время для фармакотерапии используется (назвать наиболее близкое число):

1. 200 мишеней лекарств
2. 500 мишеней лекарств
3. 2000 мишеней лекарств
4. 5000 мишеней лекарств

Правильно – 2

13. Наличие отрицательных обратных связей в регуляторных сигнальных сетях приводит к:

1. ослаблению действия лекарственного препарата
2. усилению действия лекарственного препарата
3. побочным эффектам действия лекарственного препарата
4. ремиссии патологического процесса

Правильно – 1

14. Выявление наиболее перспективных мишеней требует:

1. использования нейронных сетей с обратным распространением ошибок
2. значительного повышения точности диагностических методов
3. высокопроизводительного скрининга миллионов химических соединений
4. моделирования поведения регуляторных сигнальных сетей при блокаде отдельных узлов и их комбинаций

Правильно – 4

15. Компьютерная программа PharmaExpert позволяет:

1. находить информацию о лекарственных препаратах, разрешенных к медицинскому применению
2. находить информацию о разрабатываемых лекарственных препаратах
3. находить химические соединения, действующие на несколько мишеней
4. находить наиболее перспективные мишени для терапии определенного заболевания

Правильно – 3

16. Формула для оценки специфичности классификации:

1. TP / TN
2. $(TN+TP) / (TP+TN+FP+FN)$
3. $TN / (TP+FP)$
4. $(TP+FP) / (TN+FN)$

Правильно – 3

17. Формула для оценки точности (Accuracy) классификации:

1. TP / TN
2. $(TN+TP) / (TP+TN+FP+FN)$
3. $TP / (TP+FN)$
4. $(TP+FP) / (TN+FN)$

18. Методы обучения с учителем используются для:

1. разбиения объектов на однородные группы, когда информация о классах недоступна
2. формирования решающего правила на основе обучающей выборки
3. оценки точности классификации
4. построения ROC-кривой

Правильно – 2

19. Основной метаболит лекарственных соединений в организме человека - это:

1. молекула альбумина, с которой связывается лекарственный препарат
2. монооксигеназная система цитохромов P450
3. макромолекула, взаимодействие препарата с которой приводит к возникновению фармакотерапевтического эффекта
4. коллаген – основной белок соединительной ткани в организме

Правильно – 2

20. Появление мутаций в гене белка-мишени приводит к такому негативному последствию как:

1. ослаблению действия лекарственного препарата
2. усилению действия лекарственного препарата
3. побочным эффектам действия лекарственного препарата
4. ремиссии патологического процесса

Правильно – 1

4. Вопросы к дифференцированному зачету

по теме «Компьютерное конструирование лекарств»:

1. Основная догма хемоинформатики.
2. Приведите примеры представления молекул.
3. Опишите цели компьютерного представления химических структур.
4. Что такое MOL формат.
5. Что такое регуляторные сети? Их характеристика, свойства, способы представления и принципы моделирования?
6. Основные этапы компьютерного конструирования лекарств на основе структуры макромолекулы-мишени.
7. Сформулируйте основную гипотезу QSAR/QSPR, условия и ограничения ее выполнения
8. Как обозначаются и как вычисляются коэффициент детерминации и коэффициент детерминации предсказания, в чем состоит их основной смысл?
9. Фазы биотрансформации лекарств. Основные ферменты биотрансформации лекарств.
Роль цитохромов P450 в биотрансформации лекарств; методы их компьютерного исследования.
10. Что такое оценочная функция?
11. Что представляют собой «джеренерики» и инновационные препараты?
12. Основные этапы создания новых лекарственных препаратов.
13. Что такое системная биология? Использование методов системной биологии для поиска фармакологических мишеней.
14. Опишите методы выявления прототипов новых лекарств: случайный поиск, рациональное конструирование и др.
15. Что такое биологически активные вещества?

16. Природные соединения, как основа для создания новых фармакологических веществ.
17. Комбинаторная химия как источник веществ для высокопроизводительного скрининга.
18. Критерии перспективности нового лекарственного препарата. Критерии патентуемости разработки.
19. Что такое препараты-«блокбастеры»?
20. Основные причины, примеры и последствия неудач при создании новых лекарственных препаратов.

5. Оценивание результатов обучения

Критерии дифференцированного зачета:

1) Оценка «удовлетворительно» - правильные и конкретные, без грубых ошибок ответы на основные вопросы. Наличие отдельных неточностей в ответах. В целом правильные ответы с небольшими неточностями на дополнительные вопросы. Некоторое использование в ответах на вопросы материалов рекомендованной литературы.

Оценка «хорошо» - твердые и достаточно полные знания программного материала, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений. Последовательные и правильные, но недостаточно развернутые ответы на основные вопросы. Правильные ответы на дополнительные вопросы. Ссылки в ответах на вопросы на отдельные материалы рекомендованной литературы.

Оценка «отлично» - глубокие исчерпывающие знания всего программного материала, понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений. Логически последовательные, полные, правильные и конкретные ответы на все основные вопросы. Правильные и конкретные ответы на дополнительные вопросы. Использование в необходимой мере в ответах на вопросы материалов всей рекомендованной литературы.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется в случае, когда количество неправильных ответов превышает количество допустимых для положительной оценки.

или

2) Оценка «удовлетворительно» (51-68 баллов) – правильные и конкретные, без грубых ошибок ответы на основные вопросы. Наличие отдельных неточностей в ответах. В целом правильные ответы с небольшими неточностями на дополнительные вопросы. Некоторое использование в ответах на вопросы материалов рекомендованной литературы.

Оценка «хорошо» (69-85 баллов) – твердые и достаточно полные знания программного материала, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений. Последовательные и правильные, но недостаточно развернутые ответы на основные вопросы. Правильные ответы на дополнительные вопросы. Ссылки в ответах на вопросы на отдельные материалы рекомендованной литературы.

Оценка «отлично» (86-100 баллов) – глубокие исчерпывающие знания всего программного материала, понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений. Логически последовательные, полные, правильные и конкретные ответы на все

основные вопросы. Правильные и конкретные ответы на дополнительные вопросы. Использование в необходимой мере в ответах на вопросы материалов всей рекомендованной литературы.

Оценка «неудовлетворительно» (0-50 баллов) выставляется в случае, когда количество неправильных ответов превышает количество допустимых для положительной оценки.

Составители:

Д.б.н., профессор РАН, в.н.с. лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств отдела биоинформатики ИБМХ, зав. кафедрой биоинформатики медико-биологического факультета ФГБОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Лагунин А.А.

Д.б.н., зав. лабораторией структурной биоинформатики отдела биоинформатики ИБМХ Веселовский А.В.