Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Факультет биоинженерии и биоинформатики

УТВЕРЖДАЮ
И.о. декана факультета биоинженерии
и биоинформатики МГУ
_____ / А.А. Замятнин /
«___» _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

«Компьютерные технологии в поиске новых лекарственных средств (на английском языке)»

Уровень высшего образования:

магистратура

Направление подготовки:

33.04.01 «Промышленная фармация»

Направленность (профиль) образовательной программы:

«Фармацевтическая разработка»

Форма обучения:

очная

Рассмотрено и одобрено Учёным советом факультета
биоинженерии и биоинформатики МГУ
(протокол № 12 от «12» 11 2024 г.)

Москва 2024

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования (ОПОП ВО) – программ магистратуры по направлению подготовки 33.04.01 «Промышленная фармация», утвержденным приказом МГУ от 8 сентября 2023 г. № 1180.

Год (годы) приема на обучение: 2025, 2026.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Дисциплина (модуль) «Компьютерные технологии в поиске новых лекарственных средств (на английском языке)» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений (дисциплины по выбору), раздел учебного плана – Блок 1 «Дисциплины (модули)». Дисциплина реализуется на 1-м курсе в 2-м семестре.

Дисциплина по выбору осваивается в пределах соответствующего блока учебного плана.

Цель освоения дисциплины: освоение англоязычного вычислительного рабочего процесса поиска кандидатов с критической оценкой предсказаний и воспроизводимости.

Задачи дисциплины:

– Освоить: chemical data curation.

– Освоить: descriptors and chemical space.

– Освоить: structure-based screening.

– Освоить: predictive models.

– Освоить: admet and prioritization.

– Освоить: reproducible project.

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

Знания предшествующего уровня высшего образования по химии, биологии и математике. Входная диагностика проводится на первом занятии; специальный производственный опыт не требуется.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
ОПК-4. Способен к анализу, систематизации и представлению данных научных исследований в области обращения лекарственных средств	ИД-ОПК-4.2. Выбирает и применяет методы обработки, оценки и представления результатов научного исследования	**Знает:** методы хемоинформатики, докинга и валидации моделей **Умеет:** строить воспроизводимый расчетный конвейер **Владеет:** навыками анализа качества вычислительных результатов

Компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
УК-5. Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном языке (иностранных языках), для академического и профессионального взаимодействия	ИД-УК-5.1. Ведет устную и письменную академическую и профессиональную коммуникацию на иностранном языке	**Знает:** английскую терминологию drug discovery **Умеет:** объяснять методы и ограничения на английском языке **Владеет:** навыками подготовки научно-технического отчета

4. Объем дисциплины (модуля)

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е. (72 академических часов), в том числе 64 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, и 8 академических часов на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – зачет в 2-м семестре.

Вид учебной работы	Всего, ак. ч	Семестр 2
Контактная работа, всего	**64**	**64**
в т.ч. занятия лекционного типа	32	32
в т.ч. лабораторные занятия	0	0
в т.ч. практические занятия	32	32
в т.ч. семинары	0	0
Самостоятельная работа обучающегося	8	8
Форма промежуточной аттестации	**–**	**зачет**
Общая трудоемкость, ак. ч / з.е.	72 / 2	72 / 2

Часы промежуточной аттестации отдельно не выделяются; дополнительная нагрузка сверх общей трудоемкости дисциплины не вводится.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

5.1. Структура дисциплины (модуля) по темам (разделам)

Тема / раздел	Лек.	Лаб.	Практ.	Сем.	СРС	Всего	Контроль
Тема 1. Chemical data curation	6	0	6	0	2	14	practical task
Тема 2. Descriptors and chemical space	6	0	6	0	2	14	practical task
Тема 3. Structure-based screening	5	0	5	0	1	11	practical task
Тема 4. Predictive models	5	0	5	0	1	11	practical task
Тема 5. ADMET and prioritization	5	0	5	0	1	11	practical task
Тема 6. Reproducible project	5	0	5	0	1	11	practical task
Итого, семестр 2	**32**	**0**	**32**	**0**	**8**	**72**	**зачет**

5.2. Содержание разделов (тем) дисциплины

№ п/п	Наименование темы	Содержание темы
1	Тема 1. Chemical data curation	SMILES, salts, stereochemistry, units and assay metadata. Practice: clean a small activity dataset.

№ п/п	Наименование темы	Содержание темы
2	Тема 2. Descriptors and chemical space	Molecular descriptors, fingerprints, similarity and clustering. Practice: select a diverse compound subset.
3	Тема 3. Structure-based screening	Protein and ligand preparation, protonation, binding site selection, docking and rescoring. Practice: redocking a reference ligand.
4	Тема 4. Predictive models	Regression/classification, baselines, scaffold splits, leakage and applicability domain. Practice: compare random and scaffold splits.
5	Тема 5. ADMET and prioritization	Solubility, permeability, metabolic liabilities and off-target hypotheses. Multi-parameter ranking and uncertainty.
6	Тема 6. Reproducible project	Versions, seeds, datasets, notebooks, provenance and English presentation. Produce an auditable candidate shortlist.

6. Фонд оценочных средств (ФОС, оценочные и методические материалы) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

6.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости

Текущий контроль успеваемости осуществляется в формах: практические задания, тестирование, решение кейсов и защита мини-проекта. Полный комплект оценочных материалов с ключами и эталонами ответов приведен в Фонде оценочных средств по дисциплине (отдельный документ). Примеры заданий:

1. What is SMILES?

а) A clinical endpoint; б) A protein assay; в) A manufacturing license; г) A textual molecular representation

2. Which split better tests new scaffolds?

а) Random split always; б) Scaffold-based split; в) Splitting after target leakage; г) Training-set evaluation

3. A docking score is:

а) A measured clinical benefit; б) A guaranteed Ki; в) A model-dependent estimate; г) A toxicity certificate

Пример ситуационной задачи: A model has R^2=0.90 on a random split and 0.25 on a scaffold split. Discuss in English.

Примерные темы докладов (рефератов, эссе, проектов):

1. Prepare a justified project report: A model has R^2=0.90 on a random split and 0.25 on a scaffold split. Discuss in English.

6.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация в 2-м семестре проводится в форме: зачет (по результатам текущего контроля и собеседования по вопросам к зачету).

Примерный перечень вопросов к промежуточной аттестации:

1. Why should IC50 values from different assays not be pooled blindly?
2. What does a Tanimoto score measure?
3. Why is a docking score not a measured binding affinity?
4. What is data leakage?
5. Why should candidates not be ranked by potency alone?
6. What belongs in the limitations section?
7. Explain: Chemical data curation
8. Explain: Descriptors and chemical space

9. Explain: Structure-based screening
10. Explain: Predictive models
11. Explain: ADMET and prioritization
12. Explain: Reproducible project

6.3. Шкала и критерии оценивания результатов обучения

Для оценивания результатов обучения по дисциплине используется шкала, соотнесенная с индикаторами достижения компетенций. При промежуточной аттестации в форме зачета оценка «зачтено» соответствует уровням «удовлетворительно», «хорошо», «отлично», оценка «не зачтено» – уровню «неудовлетворительно».

Результат обучения	2 (не зачтено)	3 (зачтено)	4 (зачтено)	5 (зачтено)
Знания	Отсутствие знаний или фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений или частично освоенное умение	В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение	Успешное и систематическое умение
Навыки (владение, опыт деятельности)	Отсутствие навыков или фрагментарное применение	В целом успешное, но не систематическое применение	В целом успешное, но сопровождающееся отдельными ошибками применение	Успешное и систематическое применение

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной и дополнительной литературы

Основная литература:

1. Головин А.В. Поиск новых биоактивных молекул и хемоинформатика. Молекулярное моделирование в применении к биомолекулам. ФББ МГУ, 2024 [Электронный ресурс]. URL: https://kodomo.fbb.msu.ru/~golovin/mmlectures/ll2.pdf.

Дополнительная литература:

1. Python Software Foundation. The Python Tutorial [Электронный ресурс]. URL: https://docs.python.org/3/tutorial/.

Нормативные правовые акты и руководства:

1. Решение Совета Евразийской экономической комиссии от 3 ноября 2016 г. № 78 «О Правилах регистрации и экспертизы лекарственных средств для медицинского применения» [Электронный ресурс]. URL: http://docs.eaeunion.org/docs/ru-ru/01411969/cncd_21112016_78.

Библиотечные издания используются в соответствии с правилами доступа НБ МГУ. Электронные нормативные документы и открытая учебная документация выделены отдельно; сведения об источниках и условиях доступа включены в реестр ресурсного обеспечения.

7.2. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

– Головин А.В. Поиск новых биоактивных молекул и хемоинформатика. Молекулярное моделирование в применении к биомолекулам. ФББ МГУ, 2025 [Электронный ресурс]. URL: https://kodomo.fbb.msu.ru/~golovin/mmlectures/l2.pdf

– Python Software Foundation. The Python Tutorial [Электронный ресурс]. URL: https://docs.python.org/3/tutorial/

– Каталог Научной библиотеки МГУ: https://nbmgu.ru/search/

– Акты ЕАЭС в сфере лекарственных средств: https://eec.eaeunion.org/comission/department/deptexreg/formirovanie-obshchikh-rynkov/akty-v-sfere-ls.php

7.3. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения

Python 3, Jupyter, PostgreSQL (для курса баз данных), RDKit (для хемоинформатики), офисный пакет; версии фиксируются в учебном проекте.

7.4. Описание материально-технической базы

Требования к условиям реализации дисциплины:

Компьютерный класс с доступом к учебным наборам обезличенных данных и открытой документации. Реальные персональные данные и производственные учетные записи не используются.

8. Язык преподавания

Английский. Содержательные задания и ответы ФОС представлены на английском языке; организационные разделы оформлены на русском.

9. Преподаватель (преподаватели)

ФИО, ученая степень, звание, должность, подразделение:
Головин Андрей Викторович, доктор химических наук, профессор

10. Разработчик (разработчики) программы

ФИО, ученая степень, должность, подразделение:
Головин Андрей Викторович, доктор химических наук, профессор

Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП указано в Общей характеристике ОПОП.

Методические рекомендации и условия для лиц с ОВЗ

Для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов формы проведения текущего контроля и промежуточной аттестации устанавливаются с учетом индивидуальных психофизических особенностей (устно, письменно, с использованием электронной информационно-образовательной среды); при необходимости предоставляется дополнительное время для подготовки ответа.