

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Обнинский институт атомной энергетики –
филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
(ИАТЭ НИЯУ МИФИ)

Одобрено на заседании

Ученого совета ИАТЭ НИЯУ МИФИ

протокол от 30.10.2023 г. № 23.10

ФОНД
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

«Компьютерный дизайн лекарственных средств»

Направление подготовки:	01.04.02 «Прикладная математика и информатика»
Профиль:	«Биоинформатика и анализ данных в биологии и медицине»
Квалификация (степень) выпускника:	магистр
Форма обучения:	очная

20__ г.

Область применения

Фонд оценочных средств (ФОС) – является неотъемлемой частью учебно-методического комплекса учебной дисциплины «Компьютерный дизайн лекарственных средств» и предназначен для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу данной дисциплины.

Цели и задачи фонда оценочных средств

Целью Фонда оценочных средств является установление соответствия уровня подготовки обучающихся требованиям федерального государственного образовательного стандарта.

Для достижения поставленной цели Фондом оценочных средств по дисциплине «Компьютерный дизайн лекарственных средств» решаются следующие задачи:

- контроль и управление процессом приобретения обучающимися знаний, умений и навыков предусмотренных в рамках данного курса;
- контроль и оценка степени освоения компетенций, предусмотренных в рамках данного курса;
- обеспечение соответствия результатов обучения задачам будущей профессиональной деятельности через совершенствование традиционных и внедрение инновационных методов обучения в образовательный процесс в рамках данного курса.

1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

В результате освоения ООП магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенций	Результаты освоения ООП <i>Содержание компетенций*</i>	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине**
ПК-2	Способен к разработке и внедрению наукоемкого программного обеспечения, способствующего решению передовых задач науки и техники на основе современных математических методов и алгоритмов	З-ПК-2 Знать текущее положение современных научных достижений, современные математические методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения. У-ПК-2 Уметь применять современные математические методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения В-ПК-2 Владеть навыками разработки и внедрения наукоемкого программного обеспечения
ПК-11	Способен использовать инструменты и методы биоинформатики для анализа результатов высокопроизводительного секвенирования и OMICS данных при выполнении диагностических, клинических и научных исследований.	З-ПК-11. Основы молекулярной биологии, медицинской генетики, современные методы протеомики, метаболомики, метагеномики и геносистематики. У-ПК-11. использовать базовые алгоритмические знания и представления об алгоритмах анализа больших массивов современных биологических и медикобиологических данных. В-ПК-11. современными цифровыми

		информационными технологиями для сбора, хранения, обработки, анализа и передачи научной информации, в том числе для работы с базами данных (Big Data).
--	--	--

1.2. Этапы формирования компетенций в процессе освоения ООП магистратуры

Компоненты компетенций, как правило, формируются при изучении нескольких дисциплин, а также в немалой степени в процессе прохождения практик, НИР и во время самостоятельной работы обучающегося. Выполнение и защита ВКР являются видом учебной деятельности, который завершает процесс формирования компетенций.

Место дисциплины и соответствующий этап формирования компетенций в целостном процессе подготовки по образовательной программе можно определить по матрице компетенций, которая приводится в Приложении 1.

Этапы формирования компетенции в процессе освоения дисциплины:

- **начальный** этап – на этом этапе формируются знаниевые и инструментальные основы компетенции, осваиваются основные категории, формируются базовые умения. Студент воспроизводит термины, факты, методы, понятия, принципы и правила; решает учебные задачи по образцу;
- **основной** этап – знания, умения, навыки, обеспечивающие формирование компетенции, значительно возрастают, но еще не достигают итоговых значений. На этом этапе студент осваивает аналитические действия с предметными знаниями по дисциплине, способен самостоятельно решать учебные задачи, внося коррективы в алгоритм действий, осуществляя коррекцию в ходе работы, переносит знания и умения на новые условия;
- **завершающий** этап – на этом этапе студент достигает итоговых показателей по заявленной компетенции, то есть осваивает весь необходимый объем знаний, овладевает всеми умениями и навыками в сфере заявленной компетенции. Он способен использовать эти знания, умения, навыки при решении задач повышенной сложности и в нестандартных условиях.

Этапы формирования компетенций в ходе освоения дисциплины отражаются в тематическом плане (см.п. 4 рабочей программы дисциплины).

1.3. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции (или её части) / и ее формулировка	Наименование оценочного средства
Текущий контроль			
1.	Раздел 1-3	ПК-2	Контрольная работа
2.	Раздел 4-5	ПК-11	Контрольная работа
Промежуточный контроль			
	ЗАЧЕТ	ПК-2, ПК-11	Зачетный билет

2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Конечными результатами освоения программы дисциплины являются сформированные когнитивные дескрипторы «знать», «уметь», «владеть», расписанные по отдельным компетенциям, которые приведены в п.1.1. Формирование этих дескрипторов происходит в процессе изучения дисциплины по этапам в рамках различного вида учебных занятий и самостоятельной работы.

Выделяются три уровня сформированности компетенций на каждом этапе: пороговый, продвинутый и высокий.

Уровни	Содержательное описание уровня	Основные признаки выделения уровня	БРС, % освоения	ECTS/Пятибалльная шкала для оценки экзамена/зачета
Высокий <i>Все виды компетенций сформированы на высоком уровне в соответствии с целями и задачами дисциплины</i>	Творческая деятельность	<i>Включает нижестоящий уровень.</i> Студент демонстрирует свободное обладание компетенциями, способен применить их в нестандартных ситуациях: показывает умение самостоятельно принимать решение, решать проблему/задачу теоретического или прикладного характера на основе изученных методов, приемов, технологий	90-100	A/ Отлично/ Зачтено
Продвинутый <i>Все виды компетенций сформированы на продвинутом уровне в соответствии с целями и задачами дисциплины</i>	Применение знаний и умений в более широких контекстах учебной и профессиональной деятельности, нежели по образцу, большей долей самостоятельности и инициативы	<i>Включает нижестоящий уровень.</i> Студент может доказать владение компетенциями: демонстрирует способность собирать, систематизировать, анализировать и грамотно использовать информацию из самостоятельно найденных теоретических источников и иллюстрировать ими теоретические положения или обосновывать практику применения.	85-89	B/ Очень хорошо/ Зачтено
			75-84	C/ Хорошо/ Зачтено
Пороговый <i>Все виды компетенций сформированы на пороговом уровне</i>	Репродуктивная деятельность	Студент демонстрирует владение компетенциями в стандартных ситуациях: излагает в пределах задач курса теоретически и практически контролируемый материал.	65-74	D/Удовлетворительно/ Зачтено
			60-64	E/Посредственно /Зачтено
Ниже порогового	Отсутствие признаков порогового уровня: компетенции не сформированы. Студент не в состоянии продемонстрировать обладание компетенциями в стандартных ситуациях.		0-59	Неудовлетворительно/ Зачтено

Оценивание результатов обучения студентов по дисциплине осуществляется по регламенту текущего контроля и промежуточной аттестации.

Критерии оценивания компетенций на каждом этапе изучения дисциплины для каждого вида оценочного средства и приводятся в п. 4 ФОС. Итоговый уровень сформированности компетенции при изучении дисциплины определяется по таблице. При этом следует понимать, что граница между уровнями для конкретных результатов освоения образовательной программы может смещаться.

Уровень сформированности компетенции	Текущий контроль	Промежуточная аттестация
высокий	высокий	высокий
	<i>продвинутый</i>	<i>высокий</i>
	<i>высокий</i>	<i>продвинутый</i>
продвинутый	<i>пороговый</i>	<i>высокий</i>
	<i>высокий</i>	<i>пороговый</i>
	продвинутый	продвинутый
	<i>продвинутый</i>	<i>пороговый</i>
	<i>пороговый</i>	<i>продвинутый</i>
пороговый	пороговый	пороговый
ниже порогового	пороговый	ниже порогового
	ниже порогового	-

3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков или опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Рейтинговая оценка знаний является интегральным показателем качества теоретических и практических знаний и навыков студентов по дисциплине и складывается из оценок, полученных в ходе текущего контроля и промежуточной аттестации.

Текущий контроль в семестре проводится с целью обеспечения своевременной обратной связи, для коррекции обучения, активизации самостоятельной работы студентов.

Промежуточная аттестация предназначена для объективного подтверждения и оценивания достигнутых результатов обучения после завершения изучения дисциплины.

Текущий контроль осуществляется два раза в семестр: контрольная точка № 1 (КТ № 1) и контрольная точка № 2 (КТ № 2).

Результаты текущего контроля и промежуточной аттестации подводятся по шкале балльно-рейтинговой системы.

Вид контроля	Этап рейтинговой системы Оценочное средство	Балл	
		Минимум	Максимум
Текущий	Контрольная точка № 1		
	Оценочное средство № 1 – Контрольная работа	0	30
	Контрольная точка № 2		
	Оценочное средство № 2 – Контрольная работа	0	30
Промежуточный	Зачёт		
	Оценочное средство – Зачетный билет	24	40
	...		
ИТОГО по дисциплине		60	100

Бонусы: поощрительные баллы студент получает к своему рейтингу в конце семестра за активную и регулярную работу на практических занятиях, за вовремя сданные индивидуальные задания.

По Положению бонус (премиальные баллы) не может превышать **5 баллов**.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Процедура оценивания знаний, умений, навыков по дисциплине «Компьютерный дизайн лекарственных средств» включает учет успешности по всем видам оценочных средств. Оценка качества подготовки включает текущую и промежуточную аттестацию.

Текущий контроль представляет собой проверку усвоения учебного материала, регулярно осуществляемую на протяжении обучения на каждой лабораторной работе.

Текущий контроль осуществляется в форме устного опроса, отчета по лабораторной работе, теста, докладов, рефератов и контрольных работ.

Формой **промежуточного контроля** является экзамен, баллы за который выставляются по итогам устного опроса на экзамене.

По окончании семестрового курса освоения дисциплины проводится промежуточная аттестация в виде экзамена, что позволяет оценить совокупность приобретенных в процессе обучения студентом профессиональных компетенций.

Экзамен складывается из двух оценочных средств, устный ответ на вопросы к экзамену, при этом студент должен ответить на 3 вопроса из примерного перечня вопросов для подготовки к экзамену и отчитаться по лабораторным работам за семестр.

Оценка по дисциплине выставляется по следующим критериям:

«Отлично» выставляется при предоставлении отчетов по лабораторным работам (не менее 70%) и сданном экзамене на отлично.

«Хорошо» выставляется при предоставлении отчетов по лабораторным работам (не менее 70 %) и сданном экзамене на хорошо.

«Удовлетворительно» выставляется при предоставлении отчетов по лабораторным работам (не менее 70 %) и сданном экзамене на удовлетворительно.

«Неудовлетворительно» выставляется студентам, если не предоставлены отчеты по лабораторным работам, либо на экзамене студент набрал менее 20 баллов.

Оценка сформированности компетенций на экзамене для тех обучающихся, которые пропускали занятия и не участвовали в проверке компетенций во время изучения дисциплины, проводится после индивидуального собеседования с преподавателем по пропущенным или не усвоенным обучающимся темам с последующей оценкой самостоятельно усвоенных знаний на экзамене.

4. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков

4.1.1 Контрольная работа

а) типовые задания (вопросы)

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Обнинский институт атомной энергетики –
филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Комплект заданий для контрольной работы
по дисциплине Компьютерный дизайн лекарственных средств

Тема: Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов

ВАРИАНТ 1

1. Что подразумевается под термином "высокопроизводительный скрининг" в контексте разработки лекарственных препаратов?
2. Какие основные задачи решаются при помощи высокопроизводительного скрининга в области медицинской и фармацевтической науки?
3. Какие типы биологических или химических тестов используются при проведении высокопроизводительного скрининга?
4. Какие преимущества предоставляет высокопроизводительный скрининг в сравнении с традиционными методами исследования в области поиска новых лекарственных соединений?

ВАРИАНТ 2

1. Какие источники химических соединений обычно используются в качестве исходных библиотек для высокопроизводительного скрининга?
2. Какие методы анализа данных применяются для обработки больших объемов информации, полученных в результате высокопроизводительного скрининга?
3. Как высокопроизводительный скрининг влияет на сокращение времени и затрат в процессе разработки новых лекарственных препаратов?
4. Приведите пример успешного применения высокопроизводительного скрининга в создании конкретного лекарственного препарата и расскажите о его значимости для медицинской практики.

Тема: Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.

ВАРИАНТ 1

1. Что представляет собой виртуальный скрининг в контексте разработки лекарственных препаратов и какова его основная цель?
2. Какие типы биомолекул обычно являются объектами виртуального скрининга на основе структуры?
3. Каким образом определение трехмерной структуры биомолекулы, такой как белка, с помощью методов, таких как рентгеноструктурный анализ или NMR-спектроскопия, влияет на виртуальный скрининг?

4. Какие программные инструменты и методы используются для докинга молекул к активным сайтам биомолекулы во время виртуального скрининга?

ВАРИАНТ 2

1. Какие параметры взаимодействия между молекулами обычно оцениваются при проведении виртуального скрининга на основе структуры?
2. В чем заключаются основные преимущества использования виртуального скрининга на основе структуры по сравнению с традиционными методами поиска лекарственных соединений?
3. Какие ограничения или вызовы могут возникнуть при применении виртуального скрининга на основе структуры, и как их можно преодолеть?
4. Приведите пример успешной разработки лекарственного препарата, основанного на результате виртуального скрининга по структуре биомолекулы, и расскажите о значимости этого примера для медицинской практики.

Контрольные работы проводятся 2 раза в семестр на модульных неделях по расписанию, устанавливаемому деканатом. Они проводятся в форме тестов или ином виде по выбору преподавателя с учетом объема изученного материала по курсу. Время проведения контрольной работы - не более 20-30 мин на работу. Для повышения эффективности данной формы контроля необходимо использовать несколько их вариантов.

Оценивание студента проводится преподавателем независимо от наличия или отсутствия студента (по уважительной или неуважительной причине) на занятии. Студенту, пропустившему по уважительной причине контрольную модульную работу, предоставляется возможность отработки. Отработать занятие можно по согласованию с преподавателем в четко установленные сроки в соответствии с графиком консультаций преподавателя, который имеется на кафедре и на официальном сайте кафедры.

Оценивается степень усвоения теоретических знаний по следующим критериям: правильность, полнота и логичность письменного ответа, способностью проиллюстрировать ответ примерами.

в) описание шкалы оценивания:

Максимальный балл за контрольную работу – 10. Каждый вопрос оценивается в 2,5 балла.

Оценка	Критерии
9 – 10 баллов «отлично»	1) полное раскрытие темы; ответы на все вопросы 2) указание точных названий и определений; 3) правильная формулировка понятий и категорий;
8 баллов «Хорошо»	1) недостаточно полное, по мнению преподавателя, раскрытие темы; ответы даны не на все вопросы 2) несущественные ошибки в определении понятий и категорий, кардинально не меняющих суть изложения; 3) наличие грамматических и стилистических ошибок и др.
6–7 баллов «Удовлетворительно»	1) ответ отражает общее направление изложения лекционного материала; 2) наличие достаточного количества несущественных или одной-двух существенных ошибок в определении понятий и категорий; 3) наличие грамматических и стилистических ошибок и др.
0–5 баллов «Неудовлетворительно»	1) нераскрытие темы; 2) большое количество существенных ошибок;

4.1.6 Экзамен

а) типовые вопросы:

1. Основные этапы разработки, испытания и внедрения лекарственного препарата.
2. Требования к лекарствам. Типичные причины отклонения лекарственных препаратов на различных этапах разработки и испытаний.
3. Алгоритм создания лекарственного препарата. Практические и теоретические создание лекарственных препаратов.
4. Метод "золотой пули". Достоинства и недостатки подхода.
5. Биологический профайлинг соединений и его использование для создания лекарственных веществ.
6. Взаимодействие протеин-протеин и лекарство-лекарство. Способы осуществления данных взаимодействий.
7. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов.
8. Комбинаторная химия. Отбор библиотек. Разбросанные и сфокусированные библиотеки. Способы отбора соединений для проведения скрининга.
9. Типичные фильтры в виртуальном скрининге.
10. Виртуальный скрининг, основанный на структуре лигандов.
11. Фармакофорный поиск с использованием структуры лиганда. Способы определения фармакофора.
12. Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы. Основные подходы, используемые при таком типе скрининга.
13. Трехмерные фармакофоры и их использование для скрининга.
14. Докинг. Основные алгоритмы докинга.
15. Скоринг. Типы скоринг функций.
16. De novo дизайн лекарственных препаратов. Основные методы de novo дизайна.
17. Использование биоизостеризма химических групп для создания лекарственных препаратов.

б) критерии оценивания компетенций (результатов):

Ответ оценивается по следующим критериям:

- правильность, полнота и логичность построения ответа;
- умение оперировать специальными терминами;
- использование в ответе дополнительного материала;
- умение иллюстрировать теоретические положения практическим материалом;

в) описание шкалы оценивания:

Допуск к экзамену по дисциплине осуществляется при количестве баллов более 36.

За семестр студент может набрать от 36 до 60 баллов.

Минимальный балл за ответ на экзамене – 24, максимальный – 40.

Общая оценка в случае дифференцировки выглядит следующим образом:

- 60-74 баллов – «удовлетворительно»;
- 75-89 баллов – «хорошо»;
- 90-100 баллов – «отлично».

Оценка «отлично» на экзамене ставится при:

- правильном, полном и логично построенном ответе;
- умении оперировать специальными терминами;
- использовании в ответе дополнительного материала;
- умении иллюстрировать теоретические положения практическим материалом.

Оценка «хорошо» на экзамене ставится при:

- правильном, полном и логично построенном ответе, но имеются негрубые ошибки или неточности;
- умении оперировать специальными терминами, но возможны затруднения в использовании практического материала;
- использовании в ответе дополнительного материала;
- умении иллюстрировать теоретические положения практическим материалом, но делаются не вполне законченные выводы или обобщения.

Оценка «удовлетворительно» на экзамене ставится при:

- схематичном неполном ответе;
- неумении оперировать специальными терминами или их незнании;
- с одной грубой ошибкой;
- неумении приводить примеры практического использования научных знаний;

Оценка «неудовлетворительно» на экзамене ставится при:

- ответе на все вопросы билета с грубыми ошибками;
- неумении оперировать специальной терминологией;
- неумении приводить примеры практического использования научных знаний.