

Документ подписан посредством электронной подписи Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 10.09.2025 14:45:02 Уникальный программный ключ: 04c19ed81fb98f3b6c8740b9a570b81	МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
	Факультет/ Кафедра Фундаментальной медицины Кафедра общей и клинической патологии
Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика» по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	
Версия документа: 1 04c19ed81fb98f3b6c8740b9a570b8122323	стр. 1 из 8
Первый экземпляр _____	КОПИЯ № _____

**Фонд оценочных средств
 для промежуточной аттестации
 по дисциплине (модулю)**

Хемоинформатика

Направление подготовки (специальность)
30.05.02 Медицинская биофизика
30.05.03 Медицинская кибернетика

Присваиваемая квалификация
Врач-биофизик; Врач-кибернетик

Форма обучения
 очная

Челябинск 2025 г



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 2 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Специальность: 30.05.02 Медицинская биофизика. 30.05.03 Медицинская кибернетика.
Направленность (профиль): Медицинская биофизика; Медицинская кибернетика.
Дисциплина: Хемоинформатика.
Семестр(ы) изучения: 8.
Форма (формы) промежуточной аттестации: экзамен.

2 ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

2.1 Компетенции, закрепленные за дисциплиной

Изучение дисциплины «Хемоинформатика» направлено на формирование
следующих компетенций:

Коды компетенции согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Содержание компетенций согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Индикаторы достижения компетенции согласно ОПОП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
1	2	3	4
ОПК-1	Способен использовать и применять фундаментальные и прикладные медицинские, естественнонаучные знания для постановки и решения стандартных и инновационных задач профессиональной деятельности	ОПК-1.1. Обладает фундаментальными и прикладными знаниями в области медицины, биологии и других естественнонаучных направлений. ОПК-1.2. Демонстрирует умение применять и использовать фундаментальные и прикладные знания в области медицины, биологии и других естественнонаучных направлений для постановки и решения информационно-аналитических и научно-исследовательских задач.	Для достижения ОПК-1.1 знать :фундаментальные основы хемоинформатики. Для достижения ОПК-1.2 знать: основные разделы хемоинформатики, необходимые в медицинской практике. Для достижения ОПК-1.1 уметь: применять фундаментальные основы хемоинформатики для решения конкретных научных задач. Для достижения ОПК-1.2 уметь: применять фундаментальные основы хемоинформатики в медицинской практике. Для достижения ОПК-1.1 владеть: навыками применения фундаментальных основ хемоинформатики для решения конкретных научных задач. Для достижения ОПК-1.2 владеть: навыками применения фундаментальных основы хемоинформатики в медицинской практике.
ОПК-5	Способен к организации и осуществлению прикладных и практических проектов и иных мероприятий по изучению и моделированию физико-химических, биохимических, физиологических процессов и явлений, происходящих в	ОПК-5.1. Демонстрирует способность применять теоретические знания в области биомедицины для разработки и осуществления проектов по изучению процессов, происходящих в клетке человека, используя современные компьютерные и информационно-коммуникационные технологии	Для достижения ОПК-5.1 знать: современные компьютерные технологии в области хемоинформатики. Для достижения ОПК-5.1 уметь: применять современные компьютерные технологии в области хемоинформатики в клинической практике. Для достижения ОПК-5.1 владеть: навыками применения современных компьютерных технологий в области хемоинформатики в клинической практике.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 3 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

	клетке человека		
ОПК-6	Способен обеспечивать информационно-технологическую поддержку в области здравоохранения; применять средства информационно-коммуникационных технологий и ресурсы биоинформатики в профессиональной деятельности; выполнять требования информационной безопасности	ОПК-6.2. Осуществляет эффективный поиск информации, необходимой для решения профессиональной деятельности, с использованием правовых справочных систем и профессиональных медико-биологических баз данных.	Для достижения ОПК-6.2 знать: основы работы с базами данных в области хемоинформатики. Для достижения ОПК-6.2 уметь: осуществлять эффективный поиск информации, необходимой для решения задач клинической практики. Для достижения ОПК-6.2 владеть: навыками эффективного поиска информации, необходимой для решения задач клинической практики.

3 СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1 Виды оценочных средств

№ п/п	Код компетенции/ планируемые результаты обучения	Контролируемые темы/ разделы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Наименование оценочного средства на промежуточной аттестации/№ задания
1	ОПК-1: Способен использовать и применять фундаментальные и прикладные медицинские, естественнонаучные знания для постановки и решения стандартных и инновационных задач профессиональной деятельности	Раздел 1. Введение в дисциплину. Раздел 2. Представление химических объектов Раздел 3. Химические базы данных Раздел 4. Молекулярное разнообразие. Раздел 5. Молекулярные дескрипторы. Раздел 6. Моделирование "структура-свойство". Раздел 7. Защита индивидуальной практической работы	Отчет по лабораторным работам, тесты	вопросы для экзамена.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 4 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

2	ОПК-5: Способен к организации и осуществлению прикладных и практических проектов и иных мероприятий по изучению и моделированию физико-химических, биохимических, физиологических процессов и явлений, происходящих в клетке человека	Раздел 1. Введение в дисциплину. Раздел 2. Представление химических объектов Раздел 3. Химические базы данных Раздел 4. Молекулярное разнообразие. Раздел 5. Молекулярные дескрипторы. Раздел 6. Моделирование "структура-свойство". Раздел 7. Защита индивидуальной практической работы	Отчет по лабораторным работам, тесты	вопросы для экзамена.
3	ОПК-6: Способен обеспечивать информационно-технологическую поддержку в области здравоохранения; применять средства информационно-коммуникационных технологий и ресурсы биоинформатики в профессиональной деятельности; выполнять требования информационной безопасности	Раздел 1. Введение в дисциплину. Раздел 2. Представление химических объектов Раздел 3. Химические базы данных Раздел 4. Молекулярное разнообразие. Раздел 5. Молекулярные дескрипторы. Раздел 6. Моделирование "структура-свойство". Раздел 7. Защита индивидуальной практической работы	Отчет по лабораторным работам, тесты	вопросы для экзамена.

Типовые задания, критерии и показатели оценивания в рамках текущего контроля представлены в рабочей программе дисциплины. Полные комплекты оценочных средств и контрольно-измерительных материалов хранятся на кафедре.

3.2. Содержание оценочных средств

Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации

Тестирование проводится по каждой теме. Примеры тестовых заданий:

1. Какие из указанных SMILES соответствует молекуле аспирина?

- CC(=O)Oc1ccccc1C(O)=O
- c1c(C(O)=O)cc(OC(O)C)ccc1
- OC(=O)c(cccc1)c1OC(=O)C
- c1(C(=O)O)ccccc1OC(=O)C

2. Какие InChI для приведенной молекулы гуанина соответствуют молекуле и являются



стандартными? а.

InChI=1/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-

3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)/f/h8,10H,6H2 b. InChI=1S/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)

c. InChI=1S/C6H6N5O2/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)

d. InChI=1/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)/f/h7,9H,6H2

3. Какой SMARTS запроса будет определять выделенную подструктуру (NcccN) в приведённой молекуле (5-butyl-4-methylbenzene-1,3-diamine)? Атомы водорода не принимать во внимание.

a. N~*~*~N

b. NcccN

c. [#7]ccc[#7]

d. [NH2]aaa[NH2]

4. Какой из приведенных SMILES удовлетворяет приведенной структуре Маркуша?

OCCc1c(C)cccc1

b. OCCCCCCCCc1cc(C(=O)O)ccc1

c. OCCCc1ccc(C(C)=O)cc1

OCCCc1ccc(COC=O)cc1

Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Перечень вопросов к экзамену

1. Линейное представление SMILES. Примерный план ответа:

-Правила.

-Представление стереоизомеров, таутомеров, ароматических структур.

-Уникальные, абсолютные, изомерные и реакционные SMILES.

2. Линейное представление InChI. Примерный план ответа:

-Правила.

-Представление стереоизомеров, таутомеров, ароматических структур.

-Стандартные InChI.

3. Представления химических реакций. Примерный план ответа:

-Представление реакции как набора реагентов и продуктов.

-Представление реакции Фуджита.

-Представление Угги-Дугуджи. 4. Представление химических реакций. Примерный план ответа:

-Представления реакций как разности продуктов и реагентов.

-Представления реакций как характеристик реакционного центра.

-Атом-атомное отображение.

5. Химическое пространство. Примерный план ответа:

-Пространство на дескрипторах,

-Пространство на графах,

-на функциях,

- облако точек.

6. Навигация в химическом пространстве дескрипторов. Примерный план ответа:

-Проекция химического пространства для визуализации.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 6 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

-Алгоритмы проекции (общая идея): PCA, SOM, GTM.

7. Навигация в химическом пространстве графов. Примерный план ответа:

-Скаффолды и каркасы.

-Скаффолды Бемиса-Мурко.

-Подход дерева скаффолдов Ертля с соавт.

8. Предобработка данных. Примерный план ответа:

-Химическая предобработка: отбор данных и стандартизация.

-Математическая предобработка: стандартизация, шкалирование, нормализация.

9. Характеристики качества моделей. Примерный план ответа:

-Характеристики регрессионных моделей: R, R², Q², REC.

-Характеристики классификационных моделей: матрица невязок, ROC, TPR, FPR, BA, AUC и др.

10. Кластеризация.

Примерный план ответа:

-Виды кластеризации.

-Иерархическая и неиерархическая.

-Агломеративная и дивизимная.

4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1 Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация проводится по окончании по окончании 8 семестра – в форме экзамена. Экзамен проводится в виде устного собеседования по вопросам дисциплины.

4.2 Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1 Критерии оценивания теста

Оценка	Отлично/ зачтено	Хорошо/ зачтено	Удовлетворитель но/зачтено	Неудовлетворительно/ незачтено
	91-100 %	81-90 %	70-80%	менее 70%
Уровень освоения проверяемых компетенций	высокий	средний	базовый	недостаточный

Высокий уровень, средний уровень, базовый уровень – «зачтено»; низкий уровень – «незачтено».

4.2.2 Критерии оценивания теоретического вопроса

Максимальный балл за ответ на теоретический вопрос — 5 баллов.



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 7 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

Отлично/ зачтено/ 5 баллов	Хорошо/ зачтено/ 4 балла	Удовлетворительно /зачтено/ 3 балла	Неудовлетвори- тельно/ незачтено/ 2 балла
Высокий уровень освоения проверяемых компетенций	Средний уровень освоения проверяемых компетенций	Базовый уровень освоения проверяемых компетенций	Недостаточный уровень освоения проверяемых компетенций
Обучающийся отлично знает материал, умеет анализировать проблему и аргументировано изложить свою точку зрения, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом, грамотно изъясняется с использованием точных терминов и названий. Обучающийся практически не допускает ошибок.	Обучающийся хорошо знает материал, умеет анализировать проблему и аргументировано изложить свою точку зрения, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом, грамотно изъясняется с использованием точных терминов и названий. Обучающийся допускает незначительные ошибки.	Обучающийся знаком с материалом, владеет достаточным для высказывания лексическим запасом. Обучающийся допускает фактические ошибки, не оперирует лексическим запасом по теме.	Обучающийся не знает основных положений вопроса, не ориентируется в основных понятиях, излагает материал с трудом, с грубыми фактическими ошибками, либо отказывается от ответов на вопросы.

4.3 Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

Критерием успешности освоения учебного материала является экспертная оценка преподавателя, учитывающая регулярность посещения лекционных и семинарских занятий, знаний теоретического раздела программы по дисциплине (в том числе материала самостоятельной работы), которые оцениваются устным опросом по вопросам дисциплины и по качеству решения ситуационных задач и тестов. Качество усвоения знаний после двух семестров завершается экзаменом.

Особенности проведения процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья обозначены в рабочей программе дисциплины (модуля).

Уровни сформированности компетенций определяется следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке «отлично»:

- предполагает формирование компетенций на высоком уровне, готовность к самостоятельной профессиональной деятельности: имеются глубокие и твердые знания программного материала учебной дисциплины, понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых явлений (процессов); формируются навыки самостоятельно анализировать факты, события, явления, процессы в их взаимосвязи и диалектическом



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)
Факультет/ Фундаментальной медицины
Кафедра общей и клинической патологии

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) «Хемоинформатика»
по специальности 30.05.02 Медицинская биофизика, 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Версия документа - 1

стр. 8 из 8

Первый экземпляр _____

КОПИЯ № _____

развитии, обосновывать выдвигаемые предложения и принимаемые решения; применять теоретические знания при решении практических задач;

- студент способен давать полные, четкие, логически последовательные, правильные ответы на поставленные вопросы; аргументировать собственную точку зрения по дискуссионным вопросам дисциплины, критически оценивать информацию о состоянии и проблемах анатомии человека, безупречно владеет приемами работы с наглядными пособиями, формулировать собственные выводы.

2. Средний уровень соответствует оценке «хорошо»:

- предполагает формирование компетенций на хорошем уровне: формируются достаточно полные и твердые знания программного материала учебной дисциплины, правильное понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых явлений (процессов); умение достаточно полно анализировать факты, события, явления и процессы, применять теоретические знания при решении практических задач; несущественные неточности при обосновании выдвигаемых предложений и принимаемых решений;

- студент способен давать последовательные, правильные, конкретные, без существенных неточностей ответы на поставленные вопросы, свободно устранять замечания о недостаточно полном освещении отдельных положений при постановке дополнительных вопросов; отвечать на вопросы теста. Количество правильных ответов – 80-90 %.

3. Базовый уровень соответствует оценке «удовлетворительно»:

- предполагает формирование компетенций на начальном уровне: знание основного программного материала учебной дисциплины, понимание сущности и взаимосвязи основных рассматриваемых явлений (процессов);

- студент способен отвечать на вопросы дисциплины без грубых ошибок, умеет применять теоретические знания к решению основных практических задач, владеет ограниченными навыками в обосновании выдвигаемых предложений и принимаемых решений. Количество правильных ответов на тесты – не менее 70%.

4. Низкий уровень соответствует оценке «неудовлетворительно»: отсутствуют знания значительной части программного материала; студент дает неправильные ответы на вопросы, недопонимает сущности излагаемых вопросов; не умеет применять теоретические знания при решении практических задач, нет навыков в обосновании выдвигаемых предложений и принимаемых решений.

