

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Komputerowe projektowanie związków chemicznych		13.3.0685	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Karolina Jagiełło; dr Agnieszka Gajewicz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		2	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 15 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 50 godz. - 2 ECTS	
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 15 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2016/2017 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania. 		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		<p>Wykład:</p> <ul style="list-style-type: none"> •zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego). <p>Ćwiczenia laboratoryjne:</p> <ul style="list-style-type: none"> •wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania), •pisemne kolokwium wejściowe przed każdym ćwiczeniem, •ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych. 	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:
Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych oraz kilku pytań otwartych (zadań) obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych.
Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
Studenti, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na zaliczenie ustne. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku student otrzymuje szanse uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego). W tym przypadku nie ma możliwości poprawienia oceny z pierwszego terminu zaliczenia na wyższą.
Negatywna ocena z zaliczenia (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas zaliczenia poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

Ćwiczenia laboratoryjne:
Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
Zaliczenie wszystkich kolokwium wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwium pisemnych (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%). Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć. Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student wie jak zbudować i prawidłowo ocenić modelu QSAR i read-across; wie jak prawidłowo odpowiedzieć na pytanie zakresu rodzajów deskryptorów oraz metod ich obliczania (K_W06, K_W07); prawidłowo wskaże zastosowania metod QSAR i read-across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K_W08) zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR i read-across (K_W10).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR i read-across (K_U01), krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania, prawidłowo prowadzi dyskusję uzyskanych wyników odnosząc się do wcześniej zdobytej wiedzy z zakresu nauk chemicznych oraz pokrewnych dyscyplin naukowych (K_U02, K_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Student dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR i read-across w kontekście społecznym i ekonomicznym (K_K06); rozumie potrzebę dalszego kształcenia się (K_K01); wykazuje kreatywność w pracy w grupie (K_K02).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

chemia ogólna

B. Wymagania wstępne

posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii

Cele kształcenia

Zaznajomienie studentów z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania komputerowych metod przewidywania właściwości związków

chemicznych rekomendowanych w rozporządzeniu REACH jako metody alternatywne.
Zapoznanie studentów z metodologią QSAR, read-across i ich współczesnymi wyzwaniem.
Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte w modelowaniu właściwości substancji chemicznych.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

Najważniejsze komputerowe metody przewidywania właściwości substancji chemicznych.
Źródła danych eksperymentalnych do modelowania QSAR i read-across.
Metody wstępnej kontroli danych: problem brakujących danych oraz tzw. punktów odbiegających, transformacje zmiennych, normalizacja rozkładu, badanie korelacji i kowariancji pomiędzy zmiennymi.
Idea i metody obliczania deskryptorów strukturalnych.
Wykorzystanie metod analizy podobieństwa oraz metod read-across do grupowania związków chemicznych wykazujących zbliżone właściwości.
Etapy budowania i walidacji modeli QSAR i read-across. Wiarygodność modeli QSAR i read-across. Kryteria jakości dla modeli QSAR występujące w REACH oraz w regulacjach prawnych innych państw (Japonia, USA).
Kryteria jakości modelu QSAR sugerowane przez OECD, które muszą być spełnione, aby wyniki zostały uznane za wiarygodne.
Wytyczne Wspólnotowego Centrum Badawczego w zakresie QSAR.

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

Rola jakości danych eksperymentalnych i chemometryczne metody wstępnej oceny jakości danych.
Przygotowanie modeli cząsteczek w zapisie współrzędnych wewnętrznych.
Optymalizacja geometrii molekuly przy wykorzystaniu metod kwantowo-mechanicznych, oraz obliczenia deskryptorów struktury.
Metody analizy podobieństwa (hierarchiczna analiza skupień – HCA, analiza głównych składowych – PCA)
Podstawowe techniki w modelowaniu QSAR.
Metody klasyfikacji i grupowania związków chemicznych – metody read-across.
Przegląd gotowych modeli komercyjnie dostępnych na rynku.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzących zajęcia.

Rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 Parlamentu Europejskiego i Rady z dnia 18 grudnia 2006 r. w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH) i utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów, zmieniające dyrektywę 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywę Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

G.W vanLoon, S.J. Duffy, „Chemia środowiska”, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2008.

T. Puzyn, A. Mostrąg-Szlichtyng, N. Suzuki, M. Haranczyk, „Metody chemometryczne w ocenie ryzyka: Ilościowe zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami (QSPR) dla nowych rodzajów zanieczyszczeń chemicznych”. W: Zuba D., Parczewski A. (Eds.): „Chemometria w nauce i praktyce. Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych”, Kraków, 2009.

B. Literatura uzupełniająca:

J. B. Czermański, A. Iwasiewicz i in.: „Metody statystyczne w doświadczeniach chemicznych”, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1992 lub wersja starsza tej książki zatytułowana „Metody statystyczne dla chemików”.

J. Mazerski, „Podstawy chemometrii”, Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk, 2000.

J. Xiong, „Podstawy bioinformatyki”, Wydawnictwo Uniwersytetu Warszawskiego, 2009.

R. B. Silverman, „Chemia organiczna w projektowaniu leków”, WNT, Warszawa, 2004.

Praca zbiorowa pod redakcją H. Kassyk-Rokickiej, „Statystyka. Zbiór zadań”, Polskie Wydawnictwo Ekonomiczne, Warszawa, 1997.

S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red), „Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis”, Amsterdam: Elsevier, 2009.

R. Kramer, „Chemometric techniques for quantitative analysis”, New York: Marcel Dekker, Inc, 2005.

D. Zuba, A. Parczewski (red.), „Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia”, Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, Kraków, 2008.

JM. Dobosz, „Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych”, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa, 2004.

Bieżące publikacje naukowe oraz opracowania i artykuły przeglądowe.

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W06 – wybiera techniki matematyki wyższej w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii
K_W07 – rozumie oraz opisuje prawidłowości, zjawiska i procesy fizykochemiczne wykorzystując język matematyki
K_W08 – wykazuje się znajomością podstawowych metod obliczeniowych do rozwiązywania problemów z zakresu chemii, fizyki i matematyki

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:
wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zaleceniami OECD;
zna podstawowe rodzaje deskryptorów struktury chemicznej oraz metody ich obliczania;
wskáže zastosowania metod QSAR i read across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemicznych;
wymieni główne wyzwania stojące przed metodami QSAR i read-across;

<p>K_W10 – wymienia i opisuje podstawowe aspekty budowy, działania i zastosowania aparatury pomiarowej oraz sprzętu wykorzystywanego w pracach eksperymentalnych z dziedziny chemii i nauk pokrewnych</p> <p>K_U01 – identyfikuje, analizuje i rozwiązuje problemy z zakresu szeroko pojętej chemii w oparciu o zdobytą wiedzę</p> <p>K_U02 – wykonuje analizy metodami eksperymentalnymi i na ich podstawie formułuje wnioski</p> <p>K_U04 – planuje i wykonuje proste eksperymenty chemiczne i analizuje otrzymane wyniki</p> <p>K_K06 – podnosi swoje kompetencje zawodowe i osobiste poprzez korzystanie z informacji podawanych w różnych źródłach</p> <p>K_K01 – identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego</p> <p>K_K02 – pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i samodzielność działania oraz współdziała w zespole przyjmując w nim różne funkcje</p>	<p>zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR i read-across; rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne;</p> <p>projektuje substancje chemiczne o pożądanych właściwościach.</p>
	<p>Umiejętności</p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <p>potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR i read-across, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów struktury;</p> <p>krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.</p>
	<p>Kompetencje społeczne (postawy)</p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <p>dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR i read-across w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa), etycznym (zmniejszenie liczby badań przeprowadzanych na zwierzętach) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);</p> <p>rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;</p> <p>wykazuje kreatywność w pracy grupie;</p> <p>wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.</p>
<p>Kontakt</p> <p>tomasz.puzyn@ug.edu.pl</p>	