

| | | | |
|---|----------------|--|--------------------|
| Nazwa przedmiotu | | Kod ECTS | |
| Podstawy chemoinformatyki - wykład fakultatywny | | brak | |
| Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot | | | |
| Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska | | | |
| Studia | | | |
| wydział | kierunek | poziom | pierwszego stopnia |
| Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki | Bioinformatyka | forma | stacjonarne |
| | | moduł specjalnościowy | Podstawowa |
| | | specjalizacja | Podstawowa |
| Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) | | | |
| dr Karolina Jagiełło | | | |
| Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin | | Liczba punktów ECTS | |
| Formy zajęć | | 3 przedmiot w wymiarze 30h wykładu + praca własna, wykład fakultatywny do wyboru, sem. 6. student wybiera 1 przedmiot specjalizacyjny i 3 przedmioty fakultatywne (po jednym z oferty każdego współtworzącego wydziału, tzn. z: biologii, informatyki, biotechnologii i chemii) | |
| Wykład | | | |
| Sposób realizacji zajęć | | | |
| zajęcia w sali dydaktycznej | | | |
| Liczba godzin | | | |
| Wykład: 30 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 | |
| praca własna - przygotowanie się do zaliczenia | | Sposób zaliczenia | |
| | | Zaliczenie na ocenę | |
| | | Formy zaliczenia | |
| | | - egzamin pisemny testowy - wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja | |
| | | Podstawowe kryteria oceny | |
| | | • Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu. • 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. | |
| Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia | | | |
| Student wie jak zbudować i prawidłowo ocenić modelu QSAR/QSPR i read-across; wie jak prawidłowo odpowiedzieć na pytanie zakresu rodzajów deskryptorów oraz metod ich obliczania (K_W01 - K_W04, K_U01); prawidłowo wskaże zastosowania metod QSAR/QSPR i read-across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związków chemicznych (K_W08) zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR/QSPR i read-across (K_W10, K_U07 - K_U09); dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR/QSPR 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 | | | |
| Znajomość podstaw matematyki i statystyki | | | |
| Cele kształcenia | | | |
| • Zaznajomienie studentów z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania komputerowych metod przewidywania toksyczności i | | | |

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

Treści programowe

1. Najważniejsze komputerowe metody przewidywania toksyczności i wybranych właściwości fizykochemicznych. 2. Źródła danych eksperymentalnych do modelowania QSAR, QSPR i read-across. 3. Metody wstępnej kontroli danych: problem brakujących danych oraz tzw. punktów odbiegających, transformacje zmiennych, normalizacja rozkładu, badanie korelacji i kowariancji pomiędzy zmiennymi. 4. Idea i metody obliczania deskryptorów strukturalnych. 5. Wykorzystanie metod analizy podobieństwa oraz metod read-across do grupowania związków chemicznych. 6. Etapy budowania i walidacji modeli QSAR, QSPR i read-across. Wiarygodność modeli QSAR, QSPR i read-across. Kryteria jakości dla modeli QSAR i QSPR występujące w REACH oraz w regulacjach prawnych innych państw (Japonia, USA). 7. Kryteria jakości modelu QSAR/QSPR sugerowane przez OECD, które muszą być spełnione, aby wyniki zostały uznane za wiarygodne. 8. Wytyczne Wspólnotowego Centrum Badawczego w zakresie QSAR.

Wykaz literatury

A.1. wykorzystywana podczas zajęć • 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 dyrektywy 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywy Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE. • OECD 2004: Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport, OECD Environment, Health and Safety Publications, Paris, France. A.2. studiowana samodzielnie przez studenta • G.W vanLoon, S.J. Duffy: Chemia środowiska. Wydawnictwo Naukowe PWN (2008). ISBN: 978-83-01-15324-3. • 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). ISBN: 978-83-87425-38-8. B. Literatura uzupełniająca: • J. B. Czermański, A. Iwasiewicz i in.: „Metody statystyczne w doświadczałnictwie chemicznym”, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1992 lub wersja starsza tej książki zatytułowana „Metody statystyczne dla chemików”. • 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. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008 • JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W01 ma pogłębioną wiedzę w zakresie, biologii, informatyki, matematyki, chemii i fizyki pozwalającą na rozumienie złożonych procesów biologicznych; zna historię rozwoju biologii i informatyki oraz ich znaczenie dla postępu nauk ścisłych i przyrodniczych, poznania świata i rozwoju społecznego; posiada wiedzę o aktualnych kierunkach rozwoju biologii i informatyki, a w szczególności w obszarze bioinformatyki

K_W02 posiada pogłębioną wiedzę w zakresie metod matematycznych, statystycznych i komputerowych, konieczną do rozwiązywania problemów bioinformatycznych o średnim poziomie złożoności; zna i upowszechnia zasadę ścisłego, opartego na danych empirycznych, interpretowania zjawisk i procesów biologicznych

K_W03 zna zaawansowane techniki doświadczalne, obserwacyjne i komputerowe pozwalające zaplanować i wykonać złożony eksperyment biologiczny, analizę bioinformatyczną lub symulację komputerową

K_W04 zna podstawowe konstrukcje programistyczne oraz pojęcia składni i semantyki języków programowania; zna podstawowe metody projektowania, analizowania i programowania algorytmów; zna podstawowe struktury danych i wykonywane na nich operacje

K_W08 ma wiedzę w zakresie podstawowych technik i narzędzi badawczych stosowanych w naukach ścisłych i przyrodniczych

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

- wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR/QSPR zgodnie z zaleceniami OECD;
- zna podstawowe rodzaje deskryptorów struktury chemicznej oraz metody ich obliczania;
- wskaże zastosowania metod QSAR/QSPR i read across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemiczne;
- wymieni główne wyzwania stojące przed metodami QSAR/QSPR i read-across;
- zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR/QSPR i read-across;
- rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne;
- wskaże związki/grupy związków chemicznych stanowiących duże zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska przyrodniczego.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

- potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR/QSPR, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów struktury;
- krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

- dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR/QSPR i read-across w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa) i

| | |
|--|--|
| <p>K_U01 potrafi zastosować wiedzę matematyczną i informatyczną do formułowania, analizowania i rozwiązywania prostych zadań związanych z bioinformatyką</p> <p>K_U06 projektuje, analizuje pod kątem poprawności i złożoności obliczeniowej oraz programuje algorytmy; wykorzystuje podstawowe techniki algorytmiczne i struktur danych</p> <p>K_U07 posługuje się przyjętymi formatami reprezentacji różnego rodzaju danych stosownie do sytuacji, pamiętając o ich ograniczeniach</p> <p>K_U08 potrafi stosować podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do prezentacji wyników i analizy danych</p> <p>K_U09 stosuje wybrane techniki i narzędzia badawcze z dziedzin nauk przyrodniczych i ścisłych</p> <p>K_K01 zna ograniczenia własnej wiedzy i rozumie potrzebę dalszego kształcenia</p> <p>K_K02 potrafi precyzyjnie formułować problemy służące pogłębieniu zrozumienia danego tematu</p> <p>K_K03 ma świadomość i zrozumienie społecznych aspektów praktycznego stosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związanej z tym odpowiedzialności</p> | <p>ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);</p> <ul style="list-style-type: none">• rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;• wykazuje kreatywność w pracy grupie;• wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę. |
| Kontakt | |