|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | **Кафедра органічної хімії і технології органічних речовин** |
| **Хемоінформатика****Робоча програма освітньої компоненти (Силабус)** |

 |

# Реквізити освітньої компоненти

|  |  |
| --- | --- |
| Рівень вищої освіти | *Другий (магістерський)*  |
| Галузь знань | *16 Хімічна інженерія та біоінженерія* |
| Спеціальність | *161 Хімічні технології та інженерія* |
| Освітня програма | *Хімічні технології та інженерія* |
| Статус освітньої компоненти | *Вибіркова* |
| Форма навчання | *Очна (денна)* |
| Рік підготовки, семестр | *2 курс, осінній семестр* |
| Обсяг освітньої компоненти | *4 кредити/120 годин (лекційні заняття – 18 годин, лабораторні заняття – 36 годин, СРС – 66 годин)* |
| Семестровий контроль/ контрольні заходи | *Залік / МКР / ДКР* |
| Розклад занять | *Лекція 2 години на два тижні (1 пара на два тижні), лабораторні роботи 2 години на тиждень (2 пари на два тижні) за розкладом на rozklad.kpi.ua*  |
| Мова викладання | *Українська* |
| Інформація про керівника курсу / викладачів | *Лектор: ас. каф. ОХ та ТОР, кандидат хімічних наук, Гайдай Олександр Васильович, sagggggas@yahoo.com**Лабораторні: ас. О.В. Гайдай* |
| Розміщення курсу | *Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance). ОК ”****Хемоінфоматика****”* [*https://classroom.google.com/c/NzU4NTA5ODk1NTIz?cjc=hphqmdj*](https://classroom.google.com/c/NzU4NTA5ODk1NTIz?cjc=hphqmdj) *- код курсу – hphqmdj* |

#  Програма освітньої компоненти

# Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчання та результати навчання

*Кількість відомих та можливих органічних сполук вимагає роботи з великими об’ємами інформації, що потребує використання спеціального програмного забезпечення для її обробки. А також використання комп’ютерних методів для передбачення властивостей органічних сполук залежно від їх структури.*

***Предмет освітньої компоненти:*** *Цифрові способи представлення хімічних даних та структури. Програмне забезпечення для роботи з хімічними базами даних.*

***Мета освітньої компоненти*** *надання здобувачам знань для робота з файлами та форматами, що містять дані про «лінійну», двовимінру чи тривимірну структуру сполук. Ознайомлення з програмними засобами для обробки хімічної інформації, та принципами їх роботи*

*Вивчення освітнього компоненту посилює наступні спеціальні (фахові)* ***компетентності****:*

* *здатність генерувати нові ідеї (креативність) (****ЗК1****);*
* *здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (****ЗК2****);*
* *здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (****ЗК3****);*
* *здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії (****ФК4****);*
* *Здатність використовувати сучасні методи досліджень, проводити наукові експерименти та вирішувати актуальні технічні задачі в області хімічних технологій та інженерії (****ФК5****);*

*Вивчення освітнього компоненту посилює наступні* ***програмні результати навчання****:*

*- здійснювати пошук необхідної інформації̈ з хімічної технології̈, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію (****ПРН2****);*

*- здійснювати у науково-технічній літературі, патентах, базах даних, інших джерелах пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, і аналізувати та оцінювати відповідну інформацію (****ПРН7****);*

*- Знання сучасних методів дослідження, приладів та обладнань, програмного забезпечення в області хімічних технологій та інженерії (****ПРН9****).*

# Пререквізити та постреквізити освітньої компоненти (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

***Пререквізити****: знання у хімічній технології та інженерії на бакалаврському рівні за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія»* *Знання з органічної хімії, стереохімії,базовий рівень володіння англійською мовою не нижче B1.*

***Постреквізити****: набуті знання та вміння можуть знадобитися для вирішення проблем в сфері хімії та хімічних технологій пов’язаних з обробкою та систематизацією великих обсягів хімічних даних.*

# Зміст освітньої компоненти

***Тема 1. Вступ. Визначення проблем хемоінформатики. Загальні відомості про молекулярне моделювання.***

***Тема 2. Методи представлення малих молекул за допомогою комп’ютера, таблиці зв’язків, молекулярні графи.***

***Тема 3. Лінійне представлення молекул.***

***Тема 4. Файли структурних даних.***

***Тема 5. Представлення хімічних реакцій.***

***Тема 6. Структура та використання хімічних баз даних.***

***Тема 7. Основи QSPR/QSAR. Молекулярні дескриптори***

***Тема 8 Молекулярна подібність.***

***Тема 9. Молекулярне моделювання***

***Тема 10. Принципи комп’ютерного конструювання (дизайну) ліків (CADD).***

***Тема 11. Молекулярний докінг. Програми молекулярного докінгу***

***Тема 12. Порядок використання програми Autodock для проведення молекулярного докінгу***

***Тема 13. Симуляція за допомогою молекулярної динаміки.***

***Тема 14 Використання машинного навчання у молекулярному моделюванні.***

# Навчальні матеріали та ресурси

*Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин та за посиланням* [*https://classroom.google.com/c/NzU4NTA5ODk1NTIz?cjc=hphqmdj*](https://classroom.google.com/c/NzU4NTA5ODk1NTIz?cjc=hphqmdj) *Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та лабораторних заняттях.*

***Базова***

*1. Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities, 2018, Engel & Gasteiger (Editors). Wiley, Amazon.*

*2. Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods, 2018, Engel & Gasteiger (Editors). Wiley, Amazon .*

***Додаткова***

*Надаются розділи классичних монографій, сучасні спеціалізовані монографії, огляди з peer-review журналів (Journal of Cheminformatics, Journal of Molecular Modeling. та ін.), орігінальні статті з peer-review журналів а також:*

*1. In Silico Medicinal Chemistry, 2016, Nathan Brown. RSC Publishing, Amazon.*

*2. Introducing Cheminformatics, 2013, David Wild. LuLu, Amazon (Kindle)*

*3. Handbook of Chemoinformatics Algorithms, 2010, Faulon & Bender. CRC, Amazon*

*4. An Introduction to Chemoinformatics, 2003, Leach & Gillet. Springer, Amazon.*

*5. Chemoinformatics: A Textbook, 2003, Gasteiger & Engel, Wiley, Amazon.)*

***Інформаційні ресурси***

*1.* [*https://orgchem.kpi.ua/cheminfo*](https://orgchem.kpi.ua/cheminfo)

# Навчальний контент

# Методика опанування освітньої компоненти

***Лекційні заняття***

*Вичитування лекцій з освітньої компоненти проводиться паралельно з розглядом питань, що виносяться на самостійну роботу. При читані лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій (Zoom) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance. Перед кожною лекцією рекомендується ознайомитись з лекційними матеріалами, а також з матеріалами, що рекомендовані для самостійного вивчення.*

|  |  |
| --- | --- |
| ***№*** | ***Опис заняття*** |
| *1* | *Вступ. Історія Хемоіоформатики та молекулярного моделювання. Основні проблеми пов’язані з дисципліною. Методи представлення малих молекул за допомогою комп’ютера, таблиці зв’язків, молекулярні графи.* |
| *2* | *Лінійне представлення молекул SMILES, SMARTS, InChI, SLN. Файли структурних даних. sdf, MDL molfile, PDB. Програми для відображення конвертації структурних даних: MDL ISIS, ChemAxon, OpenBabel* |
| *3* | *Представлення запитів для пошуку в хімічних базах даних. Правила формування виразів SMARTS, SMIRKS. Правила використання стереохімічних міток для представлення сумішей стереоізомерів.* |
| *4* | *Структура та використання хімічних баз даних. Основи проєктування хімічних баз даних. Типове представлення данних з баз у файловому вигляді. Алгоритми пошуку в базах даних по підструктурі і по подібності. Використання PubChem*  |
| *5* | *Пошук кількісних співвідношень структура-властивість (QSPR/SAR). Молекулярні дескриптори. ADME. Молекулярна подібність.* |
| *6* | *Засоби представлення тривимірних моделей малих молекул та біополімерів. База даних білків (Protein Data Bank)* |
| *7* | *Принципи комп’ютерного конструювання (дизайну) ліків (CADD).* |
| *8* | ***Модульна контрольна робота*** |
| *9* | ***Залік****Студенти, які мають низький рейтинг, а також ті, хто хоче підвищити оцінку, виконують залікову контрольну роботу у вигляді співбесіди.* |

***Лабораторні роботи***

*Метою лабораторних робіт є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та при самостійній роботі, а також набуття практичних навичок за темою освітньої компоненти. Для цього на лабораторних заняттях детально розглядаються сучасні методи та програмні засоби обробки хімічної інформації. Передбачається також самостійна робота з відкритими джерелами.*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ***Тиждень*** | ***Тема*** | ***Опис запланованої роботи*** |
| *1 (2 пари)* | *Формати хімічних даних* | *Ознайомлення форматами файлів для представлення хімічних структур та додаткових даних з використанням програми OpenBabel. Конверсія форматів* |
| *2 (2 пари)* | *SMARTS запити* | *Створення запитів SMARTS для підструктурного пошуку в хімічній базі даних* |
| *3 (2 пари)* | *Стереохімічні дескриптори* | *Використання стереохімічних міток (enhanced stereochemistry labels) для запису визначених сумішей стереоізомерів* |
| *4 (2 пари)* | *sdf-файл, як файловий аналог бази даних* | *Ознайомлення з форматом sdf файлів, додавання та систематизація супутньої інформації до відповідних структур* |
| *5 (2 пари)* | *Робота з хімічною базою PubChem програмними методами.* | *Створення запитів для пошуку в базі PubChem з використанням Python підпрограм*  |
| *6 (2 пари)* | *Проведення молекулярного докінгу в програмі Autodock.* | *Підготовка рецептора* |
| *7 (2 пари)* | *Проведення молекулярного докінгу в програмі Autodock.* | *Підготовка ліганда* |
| *8 (2 пари)* | *Проведення молекулярного докінгу в програмі Autodock.* | *Визначення сайту зв’язування. Проведення докінгу. Аналіз результатів.*  |
| *9 (2 пари)* | *Підсумкове заняття* | *Підбиття підсумків. До відома студентів доводиться кількість балів, яку вони набрали впродовж семестру* |

# Самостійна робота студента/аспіранта

*Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, підготовку до тестів, підготовку до контрольних заходів з лекційного матеріалу, підготовку до захисту лабораторних робіт, виконання розрахункової роботи, а також, підготовку до заліку. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:*

|  |  |
| --- | --- |
| *Вид СРС* | *Кількість годин на підготовку* |
| *Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу* | *10* |
| *Підготовка до МКР* | *4 години* |
| *Підготовка до захисту лабораторних робіт* | *36 годин* |
| *Виконання розрахункової роботи* | *10 годин* |
| *Підготовка до заліку* | *6 годин* |

# Політика та контроль

# Політика освітньої компоненти

*У звичайному режимі роботи університету лекції проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, лабораторні роботи – в навчальних лабораторіях. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та лабораторних робіт є обов’язковим.*

*Перед початком чергової теми лектор надсилає лекційний матеріал із застосуванням інтерактивних засобів для ознайомлення студентів та можливості їх підготовки до заняття.*

***Правила захисту ДКР:***

1. *До захисту робіт допускаються студенти, які правильно виконали та оформили відповідно до вимог письмову домашню контрольну роботу .*
2. *Захист відбувається за графіком, зазначеним у п.5 за індивідуальними завданнями.*

*2. Після перевірки завдання викладачем та захисту студентом – виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.*

***Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:***

*1. За кожний тиждень запізнення із здачі робіт нараховується 1 штрафний бал (але не більше 5 балів).*

*2. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 5 заохочувальних балів;*

*3. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з освітньої компоненти нараховується від 1 до 10 заохочувальних балів;*

*Політика строків здачі та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського*

*Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету* [*https://kpi.ua/files/honorcode.pdf*](https://kpi.ua/files/honorcode.pdf)*, що встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з ОК «Хемоінформатика»;.*

*При використанні цифрових засобів зв’язку з викладачем (мобільний зв’язок, електронна пошта, переписка в телеграм чатах) необхідно дотримуватись загальноприйнятих етичних норм, зокрема бути ввічливим та обмежувати спілкування робочим часом викладача.*

# Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

*Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:*

*1. Поточний контроль: ДКР, МКР.*

*2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабуса.*

*3. Семестровий контроль: залік.*

***Рейтингова система оцінювання результатів навчання***

*Рейтинг студента з освітньої компоненти розраховується виходячи із 100-бальної шкали, рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:*

1. *роботи на лабораторних заняттях;*
2. *виконання ДКР;*
3. *виконання МКР.*

***1. Лабораторні роботи:***

*Ваговий бал –* ***60 балів****.*

*- Кількість лабораторних робіт: 6*

*- Максимальна кількість балів на усіх роботах дорівнює 10 балів*

*«відмінно», повне і безпомилкове виконання завдання на лабораторних роботах, вільне володіння матеріалом, правильно оформлені результати виконання роботи – 10 балів;*

*«добре», незначні помилки при виконанні роботи або неналежним чином оформлені результати– 8-9 балів;*

*«задовільно», незначні помилки при виконанні роботи і неналежним чином оформлені результати або значні помилки при виконанні роботи – 6-7 балів;*

*«незадовільно» – 0 балів.*

***2. ДКР (30 балів):***

*Ваговий бал –* ***30 балів;***

*«відмінно», творче розкриття питання, вільне володіння матеріалом – 27-30 балів;*

*«добре», глибоке розкриття питання – 23-26 балів;*

*«задовільно», – 18-22 балів;*

*«незадовільно» – 0 балів;*

***3. Модульна контрольна робота:***

*Ваговий бал за МКР –* ***20 балів****.*

*«відмінно», творче розкриття теми, вільне володіння матеріалом – 19-20 балів;*

*«добре», глибоке розкриття одного з питань – 15-18 балів;*

*«задовільно», розкриття матеріалу на достатньому рівні – 12-14 балів;*

*«незадовільно» – 0 балів.*

*Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт. На першому календарному контролі (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше 0,5∙24 = 12 балів. На другому календарному контролі (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше 0,5∙54 =27 балів і зарахована домашня контрольна робота.*

*Для отримання* ***заліку*** *з освітнього компоненту необхідно мати рейтинг не менше 60 балів, зараховану домашню контрольну роботу, виконані усі лабораторні роботи, а також зарахований звіт до лабораторних робіт. Одержані впродовж семестру рейтингові бали переводяться у відповідну оцінку за наведеною нижче таблицею.*

*Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:*

|  |  |
| --- | --- |
| *Кількість балів* | *Оцінка* |
| *100-95* | *Відмінно* |
| *94-85* | *Дуже добре* |
| *84-75* | *Добре* |
| *74-65* | *Задовільно* |
| *64-60* | *Достатньо* |
| *Менше 60* | *Незадовільно* |
| *Не виконані умови допуску* | *Не допущено* |

*Студенти, які наприкінці семестру мають рейтинг менше 60 балів, а також ті, хто хоче підвищити оцінку, виконують* ***залікову контрольну роботу у вигляді співбесіди****. Необхідною умовою допуску до заліку є позитивна оцінка за домашню контрольну роботу, виконані усі лабораторні роботи та зданий звіт до лабораторних робіт. Завдання контрольної роботи складається з двох питань (теоретичного та практичного за темою лабораторних робіт) робочої програми з переліку, що надані у методичних рекомендацій до засвоєння кредитного модуля.*

*Теоретичне питання контрольної роботи оцінюється у 30 балів відповідно до системи оцінювання:*

*«відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 28÷30 балів;*

*«добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації або незначні неточності) – 22÷27 балів;*

*«задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 18÷21  балів;*

*«незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.*

*Практичне питання контрольної роботи оцінюється у 40 балів відповідно до системи оцінювання:*

*«відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 38÷40 балів;*

*«добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації або незначні неточності) – 30÷37 балів;*

*«задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 24÷29 балів;*

*«незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.*

*Одержані на заліку бали сумують із балами, що отримані за ДКР, та переводяться у відповідну оцінку за наведеною вище таблицею.*

# Додаткова інформація з освітньої компоненти

*Вимоги до оформлення домашньої контрольної роботи, перелік запитань до МКР, тадо заліку наведені у Google Classroom «Хемоінформатика» (платформа Sikorsky-distance).*

*Зарахування окремих результатів, отриманих в межах неформальної освіти, здійснюється згідно Положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті* [*https://osvita.kpi.ua/node/179*](https://osvita.kpi.ua/node/179)

**Силабус освітньої компоненти:**

*Складено*

*асистент кафедри ОХ та ТОР, к.х.н. Гайдай Олександр Васильович*

***Ухвалено*** *кафедрою ОХ та ТОР (протокол № 14 від 23.06.2024)*

***Погоджено*** *Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 21.06.2024)*