



## Основи хемінформатики та молекулярного моделювання Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

### Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	16 Хімічна та біоінженерія
Спеціальність	161 Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	<b>Хімічні-технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів</b>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова (Ф-каталог)</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	4 кредити, лекції 36 год., лабораторні заняття 36 год., Самостійна робота 48 год.
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>ДКР, МКР, залік</i>
Розклад занять	<i>За розкладом</i>
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: ас. каф. ОХ та ТОР, кандидат хімічних наук, Гайдай Олександр Васильович, <a href="mailto:sagggggas@yahoo.com">sagggggas@yahoo.com</a> Лабораторні: ас. О.В. Гайдай
Розміщення курсу	<a href="https://campus.kpi.ua/tutor/index.php?mode=mob&amp;show&amp;irid=265605">https://campus.kpi.ua/tutor/index.php?mode=mob&amp;show&amp;irid=265605</a>

### Програма навчальної дисципліни

#### 1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчання та результати навчання

##### 1.1. Мета навчальної дисципліни.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей:

- Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (К3).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (К2).і
- Здатність досліджувати, класифікувати і аналізувати показники якості хімічної продукції, технологічних процесів і обладнання хімічних виробництв. (К8)  
Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідноконструкторських розробок у сфері хімічних технологій

та інженерії. (К 11).

- Здатність використовувати сучасні програми квантово-хімічних обчислень для оптимізації хіміко-технологічних процесів, для обробки та інтерпретації результатів хімічних експериментів тому числі з органічного синтезу (К12);

## 1.2 Основні завдання навчальної дисципліни.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми навчальної дисципліни студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

- Здійснювати пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію. (ПР 2);
- 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. (ПР 7).

## 2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Міждисциплінарні зв'язки: Матеріал кредитного модуля базується на дисциплінах «Органічна хімія», «Механізми органічних реакцій», «Хімія елементорганічних сполук», «Стереохімія органічних сполук», «Моделювання хіміко-технологічних процесів і комп'ютерна хімія», «Хімія гетероциклічних сполук» і є завершальним у циклі професійної і практичної підготовки та буде використана при написанні магістерської дисертації.

## 3. Зміст навчальної дисципліни

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.

#### 4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

**Базова:** В бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин.

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:**

Надаються розділи класичних монографій, сучасні спеціалізовані монографії, огляди з peer-review журналів (*Journal of Cheminformatics*, *Journal of Molecular Modeling*. та ін.), оригінальні 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 Cheminformatics Algorithms, 2010, Faulon & Bender. CRC, Amazon
4. An Introduction to Cheminformatics, 2003, Leach & Gillet. Springer, Amazon.
5. Cheminformatics: A Textbook, 2003, Gasteiger & Engel, Wiley, Amazon.)

### Навчальний контент

#### 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

##### Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами індивідуальних завдань та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій при змішаному навчанні застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій якій передається слухачам через чат. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Кожен студент отримує індивідуальне завдання у вигляді аналізу оригінальних статей по темі лекції.

Лекція 1. Вступ. Історія Хемоіоформатики та молекулярного моделювання. Основні проблеми пов'язані з дисципліною.

Лекція 2. Методи представлення малих молекул за допомогою комп'ютера, таблиці зв'язків, молекулярні графи.

Лекція 3. Лінійне представлення молекул SMILES, SMARTS, InChI, SLN.

Лекція 4. Файли структурних даних. sdf, MDL molfile, PDB. Програми для відображення конвертації структурних даних: MDL ISIS, ChemAxon, OpenBabel

Лекція 5. Представлення хімічних реакцій. SMIRKS, rdf, rxn

Лекція 6. Структура та використання хімічних баз даних. Основи проектування хімічних баз даних. Типове представлення даних з баз у файлового вигляді.

Лекція 7. Алгоритми пошуку в базах даних по підструктурі і по подібності. Використання PubChem

Лекція 8. Пошук кількісних співвідношень структура-властивість (QSPR/SAR). Молекулярні дескриптори. ADME.

Лекція 9 Молекулярна подібність.

Лекція 10. Засоби представлення тривимірних моделей малих молекул та біополімерів. База даних білків (Protein Data Bank)

Лекція 11. Принципи комп'ютерного конструювання (дизайну) ліків (CADD).

Лекція 12. Молекулярний докінг. Програми молекулярного докінгу

Лекція 13. Порядок використання програми Autodock для проведення молекулярного докінгу Підготовка лігандів. Підготовка білків. Проведення молекулярного докінгу. Аналіз результатів.

Лекція 14. Симуляція за допомогою молекулярної динаміки. Підготовка об'єктів до симуляції молекулярної динаміки. Основи роботи з GROMACS.

Лекція 15. Використання машинного навчання у молекулярному моделюванні.

### **Лабораторні заняття**

Практичні роботи мають на меті навчити студентів самостійно оцінювати роль реакційних інтермедіатів в конкретній хімічних перетвореннях через вирішення задач.

Лабораторні заняття 1-2. Побудова малих молекул за допомогою молекулярних графів, їх лінійне представлення.

Лабораторні заняття 3-4. Робота з основними програмами для відображення структурних даних молекул.

Лабораторні заняття 5-8. Робота з sdf-файлом, як файлового аналога бази даних.

Лабораторні заняття 9-12. Робота з хімічною базою PubChem програмними методами.

Лабораторні заняття 13-17. Проведення молекулярного докінгу в програмі Autodock.

Лабораторне заняття 18. Підведення підсумки, прийом ДКР.

### **Самостійна робота студента**

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, освоєння теоретичного матеріалу винесеного на самостійне самоопрацювання, виконання індивідуальних завдань, підготовка до написання модульної контрольної роботи, підготовка до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС,            Кількість годин на підготовку

Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів 1 – 1 година на тиждень

Виконання ДКР 20 годин

Підготовка до МКР (повторення матеріалу) 4 години

Підготовка до заліку 6 годин

## Політика та контроль

### 6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Всі вимоги не суперечать законодавству України і відповідають нормативним документам Університету. У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання. На початку кожної лекції лектор може проводити опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms). Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою, підвищення зацікавленості та залучення слухачів до розв'язання прикладів.

Після перевірки завдання викладачем на захист виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.

Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

Несвоєчасне виконання практичного завдання без поважної причини штрафується 1 балом;

Політика дедлайнів 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.

### 7. 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: відвідування та виконання лабораторних занять, МКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: залік.

#### Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 50 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- Виконання індивідуальних завдань (7 тем занять);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);

## **2. Критерії нарахування балів:**

### **- 2.1. Лабораторна робота:**

- Кількість лабораторних робіт: 5
- Максимальна кількість балів на усіх роботах дорівнює 10 балів.

### **- Критерії оцінювання:**

9-10 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) на контрольні питання. Успішне виконання завдання лабораторної роботи.

6-8 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності) контрольні питання. Успішне виконання завдання лабораторної роботи, або незначні помилки при виконанні лабораторної роботи;

4-5 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки), помилки при виконанні лабораторної роботи; Успішно виконана роботи, з незадовільною відповіддю на контрольні питання.

2-3 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки), робота виконана зі значними помилками;

0-1 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь, невиконана робота

### **2.2. Модульна контрольна робота**

- Кількість завдань цього виду – 1.
- Модульна контрольна робота оцінюється в 15 балів.

### **- Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:**

13-15 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

10-12 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

6-9 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

3-5 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-2 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

### **2.2. Домашня контрольна робота**

- Кількість завдань цього виду – 1.
- Домашня контрольна робота оцінюється в 15 балів.

### **- Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:**

13-15 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

10-12 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

6-9 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

3-5 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-2 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

### Штрафні та заохочувальні бали

- За несвоєчасну здачу завдання (без поважної причини) знімається - 2 бали (тобто, при несвоєчасному написанні максимальна оцінка -3 бали ).
- Заохочувальні бали додаються :
- За активну роботу на лекції нараховується до 1 заохочувального балу (але не більше 5 балів на семестр).
- Студенти, що набрали суму балів за семестр 30 і більше (0.6 рейтингу за роботу протягом семестру) можуть скласти екзамен. Якщо семестровий рейтинг менше 30 балів потрібно додаткове опрацювання матеріалу з метою підвищення рейтингу (виконання необхідної кількості індивідуальних завдань).
- Студенти отримують позитивні атестації у семестрі , якщо поточна сума набраних балів відповідає 0,5 і більше від максимально можливої кількості балів на момент проведення атестації.

### 2.3. Залік

На заліку студенти виконують письмову роботу. Кожне завдання містить одне теоретичне запитання (завдання) і одне практичне. Кожне питання оцінюється у 20 балів.

Система оцінювання теоретичного питання:

20-18 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

15-17 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

11-14 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

6-10 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-6 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 60 балів:

$$RC = r_{лр} + r_{дкр} + r_{мкр} + r_{із} = 50+15+15+20 = 100 \text{ балів}$$

Умовою допуску до екзамену є зарахування всіх лабораторних робіт, написання МКР та кількість рейтингових балів не менше 40.

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

**8. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)**

- Перелік матеріалів, якими дозволено користуватись під час заліку: Немає

**9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)**

Перелік питань до МКР та заліку наведені у Електронному кампусі.

**Складено** ас. каф. ОХ та ТОР, кандидат хімічних наук, Гайдай Олександр Васильович

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

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