


KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Współczesne wyzwania w metodach QSAR			7.2.0337
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Ochrona Środowiska	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
specjalizacja	Podstawowa		
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Agnieszka Gajewicz; dr Karolina Jagiełło			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin			Liczba punktów ECTS
Formy zajęć			2 zajęcia - 30 godz. konsultacje - 2 godz. praca własna studenta - 18 godz. RAZEM: 50 godz. - 2 pkt. ECTS
Wykład			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		zaliczenie ustne	
		Podstawowe kryteria oceny	
		• zaliczenie praktyczne (ustne) składające się z kilku pytań sprawdzających wiedzę oraz kilku prostych zadań sprawdzających podstawowe umiejętności, jakie student nabył podczas wykładu. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.	
		• Negatywna ocena z zaliczenia musi być poprawiona podczas dodatkowego zaliczenia odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.	
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Podczas zaliczenia ustnego sprawdzana jest wiedza studenta na temat podstawowych zagadnień związanych z problematyką modelowania QSAR (K_W04); znajomości wykorzystania modelowania QSAR w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K_W08).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Po ukończeniu kursu każdy student: potrafi odpowiednio stawiać hipotezy badawcze oraz dobiera właściwe metody, techniki i narzędzia badawcze w celu weryfikacji postawionej hipotezy (K_W02, K_W04); potrafi analizować dane doświadczalne z wykorzystaniem metod statystycznych oraz potrafi konstruować i przeprowadzić walidację modeli QSAR/QSPR (K_U05); potrafi wykorzystać dostępne modele mające zastosowanie w ocenie ryzyka chemicznego.			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Po ukończeniu kursu każdy student: jest przekonany o korzyści stosowania metod komputerowych w ochronie środowiska oraz rozumie potrzebę dalszego kształcenia się w zakresie działań związanych z ochroną środowiska			

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

brak

B. Wymagania wstępne

- umiejętność obsługi komputera w zakresie podstawowym (kopiowanie plików i uruchamianie aplikacji w systemie operacyjnym Windows/Linux, arkusz kalkulacyjny, przeglądarka stron WWW);
- znajomość języka angielskiego na poziomie biegłości B2 Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego.

Cele kształcenia

- Zaznajomienie studentów z się z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania metod QSAR, a także wyzwaniami, jaki stawia się obecnie przed tymi metodami.
- Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte w modelowaniu QSAR.

Treści programowe**A. Problematyka wykładu:**

1. Podstawowe założenia, zastosowanie i ograniczenia ilościowych metod modelowania zależności pomiędzy strukturą chemiczną a aktywnością (ang. Quantitative Structure-Activity Relationships, QSAR) i właściwościami fizykochemicznymi (ang. Quantitative Structure-Property Relationships, QSPR). Idea metod opartych na grupowaniu i read across.
2. Dane eksperymentalne wykorzystywane w modelowaniu QSAR/QSPR: dostępne bazy danych; ocena jakości i przydatności danych eksperymentalnych; skala Klimischa.
3. Deskryptory struktury chemicznej: hierarchiczny podział deskryptorów; specyfikacja budowy cząsteczki; notacja SMILES; współprzędne wewnętrzne i kartezyjańskie; przegląd metod chemii teoretycznej wykorzystywanych do optymalizacji geometrii modelowanych cząsteczek i obliczania deskryptorów struktury chemicznej; przykłady deskryptorów poziomu 0D, 1D, 2D, 3D i 4D.
4. Metody chemometryczne umożliwiające grupowanie związków ze względu na podobieństwo strukturalne, aktywność oraz właściwości fizykochemiczne (analiza głównych składowych, PCA; hierarchiczna analiza wiązkowa, HCA).
5. Metody kalibracji modeli QSAR/QSPR: metoda regresji wielokrotnej (MLR), metoda regresji głównych składowych (PCR) i metoda regresji częściowych najmniejszych kwadratów (PLS).
6. Wybór optymalnego zestawu deskryptorów do modelu QSAR/QSPR: metoda środka ciężkości, algorytmy genetyczne.
7. Wewnętrzna i zewnętrzna walidacja modelu: strategie walidacji; reguły walidacji modeli QSAR wg. OECD; walidacja krzyżowa; metody podziału bazy danych na zbiór uczący i walidacyjny; parametry walidacji.
8. Szacowanie granic dziedziny modelu: metoda wykorzystująca zakres zmiennych; metoda wielokąta; metoda współczynników dźwigni; metoda gęstości prawdopodobieństwa.
9. Modele klasyfikacyjne, grupowanie i metody read across.
10. Rola metod QSAR w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemiczne; QSAR w projektowaniu i ocenie ryzyka ze strony nowych nanomateriałów.

Wykaz literatury**A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):****A.1. wykorzystywana podczas zajęć**

- T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin: Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications. ?Springer 2010. ISBN: 978-1-4020-9782-9.

- A. Mazerski: Podstawy chemometrii. Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk, 2000.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

- 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.
- T. Puzyn, D. Leszczynska, J. Leszczynski : Quantitative structure-activity relationships (QSARs) in the European RE-ACH system: Could these approaches be applied to nanomaterials? W: Leszczynski J., Shukla M. (Red.), Practical aspects of computational chemistry: Methods, concepts and applications. Special issue of Annals - The European Academy of Sciences. Springer. Heidelberg / Dordrecht / London / New York 2010 ISBN: 978-90-481-2686-6.
- H. Kubinyi: QSAR: Hansch analysis and related approaches, VCH Publishers, New York, 1993.
- S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. El-sevier, Amsterdam, 2009.
- R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis, Marcel Dekker Inc., Nowy York, 1998.
- L. Piel: Idee chemii kwantowej. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2003.

B. Literatura uzupełniająca

- T. Puzyn (2011): On the replacement of empirical parameters in multimedia mass balance models with QSPR data. J. Hazard. Mater. 192 (3), 970-977.
- T. Puzyn, B. Rasulev, A. Gajewicz, X. Hu, T. P. Dasari, A. Michalkova, H.-M. Hwang, A. Toropov, D. Leszczynska, J. Leszczynski (2011): Using nano-QSAR to predict the cytotoxicity of metal oxides. Nature Nanotechnol. 6, 175-178.
- T. Puzyn T., A. Mostrąg-Szlichtyng, A. Gajewicz, M. Skrzyński, A. P. Worth (2011): Investigating the influence of data splitting on the predictive

ability of QSAR/QSPR models. Struct. Chem. 22 (4), 795-804.

- T. Puzyn, A. Gajewicz, A. Rybacka, M. Haranczyk (2011): Global vs. local QSPR model for Persistent Organic Pollutants: Balancing between predictivity and economy. Struct. Chem. 22 (4), 873-884.
- T. Puzyn T., N. Suzuki, M. Haranczyk, J. Rak (2008): Calculation of quantum-mechanical descriptors for QSPR at the DFT level: Is it necessary? J. Chem. Inf. Model. 48 (6), 1174-1180.
- T. Puzyn, T., D. Leszczynska, J. Leszczynski (2009): Towards the development of "Nano-QSARs": Advances and challenges. Small 5 (22), 2494-2509.
- P. Gramatica (2007): Principles of QSAR models validation: internal and external. QSAR Comb. Sci. 26, 694-670.

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W02 stawia hipotezy i analizuje wyniki wykorzystując metody statystyczne oraz modelowanie w ochronie środowiska;
K_W04 wybiera metody, techniki i narzędzia badawcze stosowane w ochronie środowiska;
K_W08 opisuje kierunki rozwoju i najnowsze odkrycia w zakresie dyscyplin naukowych związanych z ochroną środowiska;
K_U05 analizuje dane doświadczalne z zakresu ochrony środowiska metodami statystycznymi oraz modelowania z wykorzystaniem technik i narzędzi informatycznych;

Wiedza

1. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zaleceniami OECD;
2. zna podstawowe rodzaje deskryptorów struktury chemicznej oraz metody ich obliczania;
3. 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;
4. wymieni główne wyzwania stojące przed metodami QSAR/QSPR;
5. zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR/QSPR;

Umiejętności

1. potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR/QSPR, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów struktury;
2. krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania.

Kompetencje społeczne (postawy)

1. dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);
2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się.

Kontakt

tomasz.puzyn@ug.edu.pl