

**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY

<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Współczesne wyzwania w metodach QSAR		7.2.0337	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>drugiego stopnia</b>
Wydział Chemii	Ochrona środowiska	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn; dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna; dr inż. Karolina Jagiełło			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		2	
Wykład		zajęcia - 30 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje - 2 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 18 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 50 godz. - 2 pkt. ECTS	
Wykład: 30 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2020/2021 letni			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
Wykład z prezentacją multimedialną		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		zaliczenie ustne	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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.</li> <li>• Negatywna ocena z zaliczenia musi być poprawiona podczas dodatkowego zaliczenia odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.</li> </ul>	
<b>Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia</b>			
Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:			
Podczas zaliczenia ustnego sprawdzana jest wiedza studenta na temat podstawowych zagadnień związanych z problematyką modelowania QSAR (K_OŚII_W04); znajomości wykorzystania modelowania QSAR w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemiczne (K_OŚII_W08).			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Po ukończeniu kursu każdy student: potrafi odpowiednio stawiać hipotezy badawcze oraz dobrać właściwe metody, techniki i narzędzia badawcze w celu weryfikacji postawionej hipotezy (K_OŚII_W02, K_OŚII_W04); potrafi analizować dane doświadczalne z wykorzystaniem metod statystycznych oraz potrafi konstruować i przeprowadzić walidację modeli QSAR/QSPR (K_OŚII_U05); potrafi wykorzystać dostępne modele mające zastosowanie w ocenie ryzyka chemicznego.			
<b>Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi</b>			
<b>A. Wymagania formalne</b>			
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. Deskrytory struktury chemicznej: hierarchiczny podział deskryptorów; specyfikacja budowy cząsteczki; notacja SMILES; współzrzedne wewnętrzne i kartezyjskie; 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 związków chemicznych; 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. Leszczyński, 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. Leszczyńska, J. Leszczyński: Quantitative structure-activity relationships (QSARs) in the European RE-ACH system: Could these approaches be applied to nanomaterials? W: Leszczyński 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. Elsevier, 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. Leszczyńska, J. Leszczyński (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.

**Kierunkowe efekty kształcenia**

K\_OŚII\_W02 stawia hipotezy i analizuje wyniki wykorzystując metody statystyczne oraz modelowanie w ochronie środowiska;

K\_OŚII\_W04 wybiera metody, techniki i narzędzia badawcze stosowane w ochronie środowiska;

K\_OŚII\_W08 opisuje kierunki rozwoju i najnowsze odkrycia w zakresie dyscyplin naukowych związanych z ochroną środowiska;

K\_OŚII\_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