



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	MODELOWANIE QSAR, QSPR, PG_00070143						
Kierunek studiów	InfoBioChem						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski Język polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. inż. Adam Kloskowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	0.0	60.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/user/index.php?id=5441						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM		
	Liczba godzin pracy studenta	60	2.0	13.0	75		
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z podstawami teoretycznymi oraz praktycznymi aspektami modelowania jakościowej i ilościowej zależności struktura-aktywność biologiczna (ang. <i>Qualitative/Quantitative Structure-Activity Relationships</i> , [Q]SAR) oraz struktura-właściwości fizykochemiczne (ang. <i>Qualitative/Quantitative Structure-Property Relationships</i> , QSPR). W trakcie kursu studenci zdobędą wiedzę teoretyczną i praktyczne umiejętności na temat metod opisu struktury związków chemicznych, obliczania deskryptorów molekularnych oraz stosowania nowoczesnych narzędzi komputerowych do budowy, walidacji i interpretacji modeli predykcyjnych (modeli [Q]SAR/[Q]SPR). Zajęcia przygotowują studentów do samodzielnego wykorzystywania narzędzi komputerowych w analizie zależności pomiędzy strukturą związków chemicznych a ich aktywnością biologiczną lub właściwościami fizykochemicznymi.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W01] zna i rozumie metody, techniki i narzędzia stosowane przy rozwiązywaniu zadań bioinformatycznych w tym z zakresu modelowania molekularnego	Student posiada wiedzę i zna podstawy teoretyczne metod modelowania [Q]SAR/[Q]SPR. Student posiada wiedzę z zakresu uczenia maszynowego niezbędną w procesie opracowania i walidacji modeli klasyfikacyjnych i regresyjnych wykorzystywanych w chemii materiałowej, toksykologii komputerowej i projektowaniu leków.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U05] potrafi wybrać metody modelowania komputerowego i zastosować je do rozwiązywania problemów z zakresu funkcjonowania i regulacji złożonych układów	Student potrafi samodzielnie zbudować i ocenić prosty model [Q]SAR/[Q]SPR i przygotować prezentację przedstawiającą najważniejsze wyniki. Student potrafi krytycznie zinterpretować uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do istniejącego stanu wiedzy.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU1] Ocena realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
	[K7_K01] jest gotów do określania priorytetów działań w realizacji zadań własnych lub powierzonych przez innych	Studenci rozumieją potrzebę ciągłego uczenia się i potrafią inspirować do tego innych. Są przygotowani do pracy zespołowej, podejmując różne role w grupie, oraz wykazują się kreatywnością w ustalaniu priorytetów niezbędnych do realizacji zróżnicowanych zadań. Rozumieją również społeczne aspekty praktycznego wykorzystania wiedzy i umiejętności, a także odpowiedzialność związaną z ich stosowaniem.	[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK2] Ocena postępów pracy [SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy [SK4] Ocena umiejętności komunikacji, w tym poprawności językowej [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
[K7_U01] potrafi korzystać z baz danych z zakresu nauk ścisłych i przyrodniczych - właściwych dla kierunku studiów InfoBioChem	Student potrafi korzystać z wybranych baz danych chemicznych i biologicznych w celu pozyskiwania danych niezbędnych do budowy, analizy i walidacji modeli QSAR/QSPR.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
Treści przedmiotu	<p>Treści przedmiotu - projekt</p> <p>Treści przedmiotu obejmują następujące obszary:</p> <ul style="list-style-type: none"> Rola jakości danych wykorzystywanych w modelowaniu [Q]SAR/[Q]SPR: metody wstępnej kontroli danych; rzetelna ocena jakości danych (np., niekompletne dane, obecność punktów odbiegających, zaszumienie danych, mała liczebność danych, etc.). Obliczanie deskryptorów molekularnych z wykorzystaniem dostępnych narzędzi np. <i>Mordred</i>, <i>PaDEL</i>, <i>RDKit</i>, <i>OCHEM</i>, etc. Przygotowanie danych wejściowych do modelowania [Q]SAR/[Q]SPR: wybór zmiennych niezależnych (np. metoda krokowa - eliminacji wstecznej lub selekcji postępującej, algorytm genetyczny, elastyczna sieć (<i>Elastic Net</i>), etc.); techniki podziału zbioru danych na zbiór uczący i zbiór testowy; standaryzacja danych. Walidacja modeli [Q]SAR/[Q]SPR: rekomendacje OECD dotyczące walidacji modeli [Q]SAR/[Q]SPR, walidacja wewnętrzna i zewnętrzna, statystyki opisowe dotyczące jakości dopasowania, elastyczności i zdolności prognostycznych modeli; dziedzina modelu. Opracowanie jakościowego i/lub ilościowego modelu [Q]SAR/[Q]SPR z wykorzystaniem dostępnych platform komputerowych (np. <i>Orange Data Mining</i>): dostrojenie hiperparametrów modelu, wewnętrzna i zewnętrzna walidacja modelu; wizualizacja i interpretacja wyników modelowania [Q]SAR/[Q]SPR. Przegląd platform (np. <i>EPI Suite</i>, <i>OECD QSAR Toolbox</i>) oferujących gotowe do użycia modele [Q]SAR/[Q]SPR. Projekt końcowy: opracowanie i przedstawienie wyników modelowania [Q]SAR/[Q]SPR dla wybranego problemu klasyfikacyjnego i/lub regresyjnego. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe			
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Laboratorium – projekt / zadanie problemowe	50.0%	100.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ul style="list-style-type: none"> Roy K, Kar S, Das RN. A Primer on QSAR/QSPR Modeling: Fundamental Concepts (SpringerBriefs in Molecular Science). 2015, Springer. ISBN:9783319172804. Todeschini R, Consonni V. Molecular Descriptors for Chemoinformatics. 2009, WileyVCH Verlag GmbH & Co. KGaA. ISBN:9783527318520.
	Uzupełniająca lista lektur	<ul style="list-style-type: none"> Dearden JC, Cronin MTD, Kaiser KLE. How not to develop a quantitative structureactivity or structureproperty relationship (QSAR/QSPR). <i>SAR and QSAR in Environmental Research</i>, 2009; 20(34), 241266. https://doi.org/10.1080/10629360902949567. Gramatica P. Principles of QSAR Modeling: Comments and Suggestions From Personal Experience. <i>International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships (IJQSPR)</i>, 2020;5(3). https://doi.org/10.4018/IJQSPR.20200701.oa1. Gramatica P. Origin of the OECD Principles for QSAR Validation and Their Role in Changing the QSAR Paradigm Worldwide: An Historical Overview. <i>Journal of Chemometrics</i>, 2025; 39(3): e70014. https://doi.org/10.1002/cem.70014. Cherkasov A, Muratov EN, Fourches D, Varnek A, Baskin II, Cronin M, Dearden J, Gramatica P, Martin YC, Todeschini R, Consonni V, Kuz'min VE, Cramer R, Benigni R, Yang C, Rathman J, Terfloth L, Gasteiger J, Richard A, Tropsha A. QSAR modeling: where have you been? Where are you going to? <i>Journal of Medicinal Chemistry</i>. 2014; 57(12):4977-5010. https://doi.org/10.1021/jm4004285.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Przykładowe zagadnienia / pytania:</p> <ul style="list-style-type: none"> Czym różni się model QSAR od QSPR? Jakie są podstawowe typy deskryptorów molekularnych? Kiedy należy stosować modele klasyfikacyjne, a kiedy regresyjne? Czym są punkty odbiegające i jak wpływają na jakość modelu QSAR/QSPR? W jaki sposób można ocenić istotność statystyczną modelu QSAR/QSPR? Co oznacza przeuczenie modelu QSAR/QSPR i jak można go uniknąć? Istota reguły Topliss-Costello? Czym się różni walidacja wewnętrzna modelu QSAR/QSPR od walidacji zewnętrznej? Kiedy uznajemy, że przewidywania modelu QSAR/QSPR są wiarygodne? Jakie są najczęstsze źródła błędów w modelowaniu QSAR/QSPR? Na podstawie macierzy pomyłek oceń precyzję modelu klasyfikacyjnego. Oceń istotność statystyczną modelu QSAR/QSPR. Porównaj zdolności prognostyczne dwóch modeli QSAR opracowanych z wykorzystaniem różnych metod uczenia maszynowego. Przeprowadź interpretację dziedziny modelu QSAR. W oparciu o klasyfikacyjny model [Q]SAR/[Q]SPR opracowany metodą k-najbliższych sąsiadów przeprowadź klasyfikację 5 nowych związków. Oceń model [Q]SAR/[Q]SPR w odniesieniu do rekomendacji OECD. 	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.