

## KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: **Chemoinformatyka (WTCAXCSM-CHINF)**

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: **Cheminformatics**

### Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii

Cykl dydaktyczny: Semestr zimowy 2026/2027

Koordynator przedmiotu cyklu: mgr inż. Bartłomiej Fliszkiewicz

### Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Zaliczenie na ocenę

### Język wykładowy:

polski

### Strona WWW:

<https://e-learning.wat.edu.pl/course/view.php?id=947>

### Skrócony opis:

Chemoinformatyka to interdyscyplinarna dziedzina nauki, wykorzystująca metody informatyczne do rozwiązywania problemów chemicznych. Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z podstawami chemoinformatyki oraz jej zastosowaniem w nowoczesnych badaniach chemicznych. Przedmiot poszerzony jest o elementy proteomiki, będącej dziedziną bioinformatyki. Studenci poznają metody komputerowego przedstawiania i analizy struktur chemicznych, zarządzania danymi chemicznymi oraz wykorzystania narzędzi informatycznych, w tym metod uczenia maszynowego, do projektowania leków i przewidywania właściwości związków chemicznych. Słuchacze dowiedzą się jak przy użyciu języka Python budować i ewaluować modele uczenia maszynowego przewidujące właściwości związków chemicznych, a także przeprowadzać modelowanie oddziaływań białko - ligand.

### Opis:

Wykłady realizowane są w formie interaktywnych notatników w środowisku Google Colab zawierających treści teoretyczne oraz wykonywalne bloki kodu. Przedmiot realizowany jest w salach komputerowych na komputerach Instytutu Chemii lub własnych, w zależności od preferencji studentów.

### Wykłady (12h)

1. Wprowadzenie do chemoinformatyki (1h)
  - Podstawowe pojęcia i definicje
  - Obszary zastosowań
2. Reprezentacja struktur chemicznych (2h)
  - Formaty zapisu struktur chemicznych (SMILES, InChI)
  - Grafy molekularne
  - Deskryptory molekularne
3. Bazy danych chemicznych i proteomicznych (2h)
  - Organizacja i struktura baz danych
  - Przegląd najważniejszych baz danych
  - Metody przeszukiwania i analizy danych
4. Podobieństwo molekularne i analiza sekwencji (2h)
  - Miary podobieństwa
  - Metody porównywania struktur
  - Analiza sekwencji białkowych
5. Projektowanie wspomagane komputerowo i uczenie maszynowe (3h)
  - Metody QSAR/QSPR
  - Dokowanie molekularne
  - Uczenie maszynowe w chemoinformatyce
6. Wizualizacja danych chemicznych i biologicznych (2h)
  - Metody wizualizacji struktur
  - Interaktywne narzędzia wizualizacyjne

### Ćwiczenia (18h)

1. Wprowadzenie do narzędzi chemoinformatycznych (1h)
  - Instalacja i konfiguracja oprogramowania
  - Podstawy chemoinformatyki w języku Python
2. Praktyczna praca z formatami chemicznymi (2h)
  - Konwersje między formatami
  - Tworzenie i edycja struktur chemicznych
  - Obliczanie deskryptorów molekularnych
3. Przeszukiwanie baz danych (4h)
  - Praktyczne wykorzystanie baz danych chemicznych
  - Wyszukiwanie struktur i podobieństw
  - Analiza i eksport danych
  - Analiza eksploracyjna danych
  - Redukcja wymiarowości danych
  - Grupowanie danych
  - Wizualizacja danych
4. Analiza sekwencji i struktur białkowych (2h)
  - Porównywanie sekwencji
  - Analiza struktur białkowych
5. Modelowanie molekularne (4h)

<ul style="list-style-type: none"> <li>◦ Dokowanie molekularne</li> <li>◦ Analiza oddziaływań ligand-receptor</li> <li>◦ Wizualizacja wyników</li> </ul> <p>6. Uczenie maszynowe w praktyce (5h)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>◦ Implementacja prostych modeli QSAR</li> <li>◦ Przewidywanie właściwości związków</li> <li>◦ Walidacja modeli</li> </ul>
<p>Dopuszcza się modyfikację tematyki wykładów i ćwiczeń celem uzupełnienia podstaw programowania w języku Python oraz ukierunkowania na tematykę interesującą słuchaczy.</p>
<p>Słuchacze mogą zadawać pytania i kierować propozycje do prowadzącego poprzez stronę internetową:</p>
<p><a href="https://www.questionwave.com/q/1768374560486">https://www.questionwave.com/q/1768374560486</a></p>
<p><b>Literatura:</b></p>
<p>Literatura podstawowa</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Leach A.R., Gillet V.J., "An Introduction to Chemoinformatics", Springer</li> <li>2. Gasteiger J., Engel T., "Chemoinformatics: A Textbook", Wiley-VCH</li> <li>3. Engel T., Gasteiger J., "Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods", Wiley-VCH</li> <li>4. Engel T., Gasteiger J., "Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities", Wiley-VCH</li> <li>5. Sydow D. Rodriguez-Guerra J., i in., „TeachOpenCADD” - <a href="https://volkamerlab.org/projects/teachopencadd/">https://volkamerlab.org/projects/teachopencadd/</a></li> <li>6. Bąk A., Polański J., „Podstawy chemoinformatyki leków”, Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego</li> <li>7. Varnek A., "Tutorials in Chemoinformatics", Wiley</li> <li>8. Leszczynski J., „Handbook of Computational Chemistry”, vol. 3, Springer</li> <li>9. Todeschini R. Consonni V., „Molecular Descriptors for Chemoinformatics”, Wiley</li> <li>10. A Creative Commons Textbook for Teaching Scientific Computing to Chemistry Students with Python and Jupyter Notebooks. J. Chem. Educ. 2021, 98, 489-494. DOI: 10.1021/acs.jchemed.0c01071 - <a href="https://weisscharlesj.github.io/SciCompforChemists/notebooks/introduction/intro.html#">https://weisscharlesj.github.io/SciCompforChemists/notebooks/introduction/intro.html#</a></li> </ol> <p>Literatura uzupełniająca</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Trinajstić N. „Chemical Graph Theory”, CRC Press</li> <li>2. Toropova A. P., Toropov A. A. „QSPR/QSAR Analysis using SMILES and Quasi-SMILES”, Springer</li> <li>3. Cartwright H. M. „Machine Learning in Chemistry”, Royal Society of Chemistry</li> <li>4. Artykuły naukowe z bieżących czasopism specjalistycznych, np. Journal of Cheminformatics, Journal of Chemical Information and Modeling,</li> <li>5. Źródła w internecie:</li> </ol> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. <a href="http://practicalcheminformatics.blogspot.com/">http://practicalcheminformatics.blogspot.com/</a></li> <li>2. <a href="https://www.cheminformania.com/">https://www.cheminformania.com/</a></li> <li>3. <a href="https://www.c-inf.net/">https://www.c-inf.net/</a></li> </ol>
<p><b>Efekty uczenia się:</b></p> <p>K_W02 - Zna współczesne poglądy na budowę i właściwości związków chemicznych.</p> <p>K_W05 - Zna wybrane programy komputerowe do modelowania molekularnego cząsteczek i ich układów oraz rozumie podstawy metod obliczeniowych w nich wykorzystywanych.</p> <p>K_U05 - Potrafi znajdować niezbędne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, zna podstawowe czasopisma naukowe z dziedziny chemii oraz ma zdolność oceny rzetelności pozyskanych informacji.</p> <p>K_U06 - Potrafi wykorzystać wiedzę informatyczną i chemiczną do stosowania profesjonalnego oprogramowania w analizie wyników i prowadzeniu symulacji związanych z problemami chemicznymi. Potrafi korzystać z komercyjnych pakietów chemicznych oraz baz informacji naukowej. Potrafi stosować zaawansowane techniki informacyjno-komunikacyjne.</p> <p>K_U07 - Potrafi w sposób krytyczny ocenić i interpretować wyniki eksperymentów, obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także przedyskutować błędy pomiarowe i wyciągnąć wnioski.</p> <p>K_U10 - Potrafi formułować i testować hipotezy związane z prostymi problemami badawczymi.</p> <p>K_K01 - Uznaje znaczenie wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych oraz zasięgnięcia opinii ekspertów w przypadku trudności z samodzielnym rozwiązaniem problemu. Potrafi krytycznie oceniać odbierane treści.</p>
<p><b>Metody i kryteria oceniania:</b></p> <p>Przedmiot zaliczany jest na podstawie projektu do samodzielnego wykonania. Przykładowe projekty:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. zbudowanie pełnego modelu predykcyjnego - od pozyskania danych, dobór odpowiednich metod i kryteriów modelowania, optymalizację parametrów ocenę zdolności predykcyjnych modelu oraz niepewności predykcji i przedstawienie wyników.</li> <li>2. statystyczna analiza danych modelowania - pozyskanie danych, dobór odpowiednich metod analizy statystycznej, przeprowadzenie wnioskowania statystycznego i przedstawienie wyników analizy.</li> </ol>
<p><b>Praktyki zawodowe:</b></p> <p>brak</p>
<p><b>Forma studiów</b></p> <p>stacjonarne</p>
<p><b>Rodzaj studiów</b></p> <p>II stopnia</p>
<p><b>Rodzaj przedmiotu</b></p> <p>wybieralny</p>
<p><b>Przedmioty wprowadzające</b></p> <p>Matematyka, Chemia organiczna, Chemia fizyczna, Chemia obliczeniowa</p>
<p><b>Programy</b></p> <p>Chemia i analiza materiałów niebezpiecznych</p>

**Forma zajęć liczba godzin/rygor**

W 12/+  
C 18/+

Razem 30 godzin

**Autor**

dr inż. Bartłomiej Fliszkiewicz

**Bilans ECTS**

1. Udział w wykładach / 12
2. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów / 10
3. Udział w ćwiczeniach / 18
4. Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń / 14
5. Przygotowanie projektu zaliczeniowego / 6

Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 60/2 ECTS

Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 60/2 ECTS

Zajęcia z udziałem nauczycieli: 30/1,2 ECTS

**Dane dotyczące przedmiotu cyklu:****Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:**

Zaliczenie na ocenę