



НАЗВА КУРСУ «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» Робоча програма
навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	16 – Хімічна інженерія та біоінженерія
Спеціальність	162 Біотехнології та біоінженерія
Освітня програма	Біотехнології
Статус дисципліни	вибіркова
Форма навчання	Денна
Рік підготовки, семестр	2 курс, весняний семестр
Обсяг дисципліни	4 кредити (120 год.), в т.ч. лекцій – 18 годин, практичних – 18 годин, СРС – 84 години.
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Залік / МКР
Розклад занять	На сайтах http://roz.kpi.ua та https://schedule.kpi.ua
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор та викладач практичних занять: доктор технічних наук, професор Горобець Світлана Василівна, телеграм чат дисципліни
Розміщення курсу	На платформі дистанційного навчання Google Клас за посиланням https://classroom.google.com/c/NjgwNzQ5NjAzODYw?cjc=imqz2vs , код класу imqz2vs, постійне посилання на Google Meet https://meet.google.com/zmc-fojv-ejv .

Програма навчальної дисципліни

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

Важливим завданням підготовки докторів філософії поряд з проведенням досліджень і написанням дисертації є підвищення інтелектуального потенціалу докторів філософії до рівня розуміння процесів утворення і розвитку нових напрямів і галузей науки і на їх основі – удосконалення існуючих, а також започаткування і розвиток нових виробництв. Навчальну дисципліну «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» призначено для набуття компетенцій, знань, умінь і досвіду щодо розуміння і прогнозування зазначених процесів у сучасній науці і в тому числі у царині біотехнології та медицині як науково-практичній діяльності.

Навчальна дисципліна «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» призначена для формування у аспірантів системи компетенцій, умінь та діяльностей з аналізу та прогнозування шляхів розвитку біотехнологічної галузі на основі застосування отриманих знань щодо молекулярних основ розробки лікарських препаратів та новітніх засобів та методів біоінформатики. Завданнями навчальної дисципліни є формування у аспірантів необхідних компетентностей, знань, навичок та вмінь для успішної постаспірантської діяльності.

Метою дисципліни є формування у аспірантів здатностей до:

- пошуку, аналізу та обробки інформації,
- роботи в міжнародному науковому просторі, проводити наукові дослідження на сучасному рівні,
- регенерувати нові ідеї для створення нових препаратів за застосування знань сучасного розвитку біоінформатики та біоінженерії,
- розробляти нові та вдосконалювати існуючі біотехнології на основі нових методів біоінженерії,
- критичного осмислення сучасних методів біоінженерії та біоінформатики для генерування нових гіпотез для адаптації нових методів в технологічні процеси,
- виконувати оригінальні дослідження у сфері біоінженерії для створення нових знань у біотехнологічній сфері,
- критично оцінювати отримані результати, приймати рішення та рекомендувати альтернативні стратегії вирішення проблем щодо створення та регулювання життєдіяльністю біологічних об'єктів, методів досліджень та технологій за їх участю.

Предметом дисципліни є закономірності процесів виникнення і подальшого розвитку теоретичних та експериментальних засад біоінформатики, методів та підходів природничих та інженерних наук щодо їх застосувань у розробці лікарських препаратів для спадкових та набутих захворювань.

В результаті вивчення навчальної дисципліни «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» здобувачі вищої освіти набувають таких **програмних результатів**:

- Знання і розуміння проблемних питань сучасної біоінформатики (в тому числі і на межі предметних галузей) для створення новітніх біотехнологій при розробці лікарських препаратів.
- Знання та використання сучасних генетичних підходів для вдосконалення біологічних агентів і регуляції біотехнологічних процесів при розробці лікарських препаратів.
- Знання сучасних методів ведення науково-дослідних робіт на рівні світових досягнень з біоінформатики для отримання нових знань та здійснення інновацій, організації і планування експерименту, практик оприлюднення результатів.
- Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.
- Планувати і виконувати експериментальні та теоретичні дослідження з використанням сучасних знань в галузі біоінформатики та інструментальних методів, критично аналізувати результати досліджень.
- Розробляти та реалізовувати наукові та інноваційні проєкти.
- Розробляти нові та вдосконалювати існуючі біотехнології на базі сучасних досягнень біоінформатики при розробці лікарських препаратів.
- Вибирати найбільш ефективні методи біоінформатики для проведення наукових досліджень при розробці лікарських препаратів.

Професійний біотехнолог наразі має знати та вміти використовувати сучасні мови програмування. Лідером серед таких мов є мова програмування python, особливо Biopython, що є колекцією некомерційних інструментів для обчислення в біології та біоінформатиці з відкритим кодом, створеною міжнародною асоціацією розробників. Biopython – це набір модулів Python, які надають функції для роботи з послідовностями ДНК, РНК і білкових послідовностей, такими як зворотна комплементация ланцюжка ДНК, пошук мотивів в білкових послідовностях тощо. Він надає безліч синтаксичних аналізаторів для читання всіх основних генетичних баз даних, таких як GenBank, SwissPort тощо, а також оболонки / інтерфейси для запуску інших популярних програм / інструментів біоінформатики, таких як NCBI BLASTN, Entrez тощо, в середовищі python.

Основний досвід, який отримує аспірант по закінченню курсу – застосування набутих знань до аналізу новітніх засобів та методів біоінформатики в розробці лікарських препаратів, а

також застосування набутих знань у процесі проведення досліджень, обговорення результатів і формуванні змісту дисертаційної роботи.

Основні вміння, які отримує аспірант по закінченню курсу:

- аналіз та вибір теоретичного базису та найбільш ефективних методів біоінформатики для проведення наукових досліджень в області технологій розробки лікарських препаратів;
- саморозвитку особистого інформаційного базису та його використання у професійній діяльності аспірантів.

Основний досвід, який отримує аспірант по закінченню курсу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів»:

В процесі вивчення дисципліни аспіранти отримують досвід застосування набутих знань до аналізу новітніх засобів та методів біоінформатики в розробці лікарських препаратів та молекулярних основ в області технологій розробки лікарських препаратів, а також застосування набутих знань у процесі проведення досліджень, обговорення результатів і формуванні змісту дисертаційної роботи.

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

Місце в структурно-логічній схемі навчання забезпечується дисциплінами, такими як загальні хімічні та біологічні дисципліни: «Біохімія», «Біофізика», «Загальна біологія», «Мікробіологія і вірусологія», «Цитологія», «Генетика», «Загальна біотехнологія», «Обладнання біотехнологічних та фармацевтичних виробництв», «Інформаційні технології», «Основи біоінформатики», «Біоінформаційні бази даних», «Сучасні досягнення біоінженерії та біоінформатики», а також базовий рівень володіння англійською мовою не нижче А2. У структурно-логічній площині програми підготовки докторів філософії з біотехнології дисципліна базується на попередньо вивчених дисциплінах магістерської програми, які створюють фундамент для подальшої дослідницької і практичної діяльності випускників докторантури як керівників вищого рівня.

На сучасному етапі розвитку суспільства досягнення науки значною мірою визначають загальні темпи технічного прогресу. Одним з основних шляхів підвищення ефективності наукових досліджень є оптимізація використання наукового потенціалу та, насамперед, праці науковців. Важливим завданням докторантської підготовки поряд з проведенням досліджень і написанням дисертації є підвищення інтелектуального потенціалу докторів філософії до рівня розуміння процесів утворення і розвитку нових напрямів і галузей науки і на їх основі – удосконалення існуючих, а також започаткування і розвиток нових виробництв.

Навчальну дисципліну «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» призначено для набуття компетенцій, знань, умінь і досвіду щодо розуміння і прогнозування зазначених процесів у сучасній науці і в тому числі у царині біотехнології як науково-практичній діяльності.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Використання мови програмування Python для задач біотехнології та розробки ліків.

Лекція 1. Огляд пакетів мови програмування python для задач біотехнології та розробки ліків. Інтегральні середовища розробки (ICP), (Integrated development environment – IDE): Pycharm Community, IDLE, Visual Studio Code, Atom, Sublime Text, Spyder, PyDev, Jupyter, Thonny, PyScripter.

Лекція 2. Пакет matplotlib python для візуалізації та аналізу експериментальних даних в біотехнології, 3D графіки та діаграми.

Лекція 3. Пакети python для задач регресійного аналізу: numpy, pandas, scikit-learn, scipy. Багатофакторна регресія, регресія Демінга (orthogonal distance regression).

Лекція 4. Пакет scipy мови програмування python для задач біоінформатики.

Лекція 5. Пакети мови програмування python для задач кластеризації в розробці ліків.

Лекція 6. Методи машинного навчання для розробки ліків. Метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining).

Лекція 7. Методи математичної статистики в розробці ліків.

Тема 2. Моделювання систем таргетної доставки та процесу дифузії лікарських препаратів з використанням мови програмування python.

Лекція 8. Моделювання систем таргетної доставки ліків з використанням пакету magpylib.

Лекція 9. Моделювання дифузії лікарських препаратів з застосуванням пакету ru-pde.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Горобець С. В. Біоінформатичні бази даних [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 162 «Біотехнології та біоінженерія» / С. В. Горобець, О. Ю. Горобець, М. О. Булаєвська ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,86 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. – 117 с. <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/36457>
2. Горобець, С. В. Основи біоінформатики [Електронний ресурс]: підручник для студентів напряму підготовки 6.051401 «Промислова біотехнологія» факультету біотехнології і біотехніки / С. В. Горобець, О. Ю. Горобець, Т. А. Хоменко ; НТУУ «КПІ». - Електронні текстові дані (1 файл: 2,72 Мбайт). – Київ : НТУУ «КПІ», 2010, 156 с.
3. О.Ю. Горобець, С.В. Горобець, К.Ю. Хахно, Мова python: для інженерних та наукових задач, КПІ ім. Ігоря Сікорського, Київ, 2024, 277с.
4. A. Géron, Hands-on Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow, Second Edition, O'Reilly Media, Inc., Sebastopol, 2019, 482 p.
5. С.В. Горобець, О.Ю. Горобець, П.П. Горбик, І.В. Уварва, Функціональні біо- та наноматеріали медичного призначення: монографія, Видавничий дім «Кондор», Київ, 2018, 480 с.
http://condor-books.com.ua/index.php?route=product/product&path=1&product_id=845.

Додаткова:

1. Яковенко А.В. Основи програмування. Python. Частина 1 [Електронний ресурс]: підручник для студ. спеціальності 122 "Комп'ютерні науки", спеціалізації "Інформаційні технології в біології та медицині" / А. В. Яковенко ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 1,59 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 195 с.
2. G. Bonaccorso, Machine Learning Algorithms, Packt Publishing, Birmingham, 2017, 360 p.
3. J. Unpingco, Python for Probability, Statistics, and Machine Learning, Springer, San Diego, 2016, 384 p.
4. K. Strømgaard, P. Krogsgaard-Larsen, U. Madsen, Textbook of Drug Design and Discovery, CRC Press Taylor & Francis Group, Boca Raton, London, New York, 2016, 450 p.
5. Personalized Medicine Coalition, The Case for Personalized Medicine 4th edition, (2014) 66 https://www.personalizedmedicinecoalition.org/Userfiles/PMC-Corporate/file/pmc_the_case_for_personalized_medicine.pdf
6. Wolfgang Sadee, Danxin Wang, Katherine Hartmann, Amanda Ewart Toland. PHARMACOGENOMICS: Driving Personalized Medicine // Pharmacological Reviews, Vol. 75, Issue 3 2023, doi: 10.1124/pharmrev.122.000810 <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/36927888/> .
7. M.S. Williams, Early Lessons from the Implementation of Genomic Medicine Programs, Annu. Rev. Genomics Hum. Genet. (2019).
<https://doi.org/10.1146/annurev-genom-083118-014924> .
8. US National Library of Medicine, What is pharmacogenomics?, Genet. Home Ref. (2022).
<https://medlineplus.gov/genetics/understanding/genomicresearch/pharmacogenomics/>

9. Elena Fountzilias, Apostolia M. Tsimberidou, Henry Hiep Vo & Razelle Kurzrock. Clinical trial design in the era of precision medicine // *Genome Medicine* volume 14, Article number: 101 (2022) <https://genomemedicine.biomedcentral.com/counter/pdf/10.1186/s13073-022-01102-1.pdf>
10. Virginia B. Kraus Biomarkers as drug development tools: discovery, validation, qualification and use. // *Nature Reviews Rheumatology* volume 14, pages 354–362 (2018) <https://doi.org/10.1038/s41584-018-0005-9>
11. Peng Zhang, Chang-Bo Zheng, Zhen Chen, Xiao-Yu Liu. Editorial: The Role of Calcium Channels in Human Health and Disease // *Front. Mol. Biosci.*, 2022 Sec. Molecular Diagnostics and Therapeutics Volume 9. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2022.834108>
12. Nasseem Ahamad, Brij B Singh. Calcium channels and their role in regenerative medicine // *World J Stem Cells* 2021 April 26; 13(4): 260-280. <https://www.f6publishing.com>
13. Gorobets O., Gorobets S., Sharai I., Polyakova T., Zablotskii V.. Interaction of magnetic fields with biogenic magnetic nanoparticles on cell membranes: physiological consequences for organisms in health and disease // *Bioelectrochemistry* (2023) <https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2023.108390>
14. P. J. Dalal, D. P. Sullivan, E. W. Weber, D. B. Sacks, M. Gunzer, I. M. Grumbach, J. Heller Brown, and W. A. Muller, Spatiotemporal Restriction of Endothelial Cell Calcium Signaling Is Required during Leukocyte Transmigration, *J. Exp. Med.* 218, (2021) <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/32970800/>
15. Y. Chang, M. Funk, S. Roy, E. Stephenson, S. Choi, H. V. Kojouharov, B. Chen, and Z. Pan, Developing a Mathematical Model of Intracellular Calcium Dynamics for Evaluating Combined Anticancer Effects of Afatinib and RP4010 in Esophageal Cancer, *Int. J. Mol. Sci.* 23, 1763 (2022). <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC8836083/>
16. Z. Peth, K. Najder, E. Bulk, A. Schwab, Mechanosensitive ion channels push cancer progression, *Cell Calcium.* 80 (2019) 79–90 p. <https://doi.org/10.1016/j.ceca.2019.03.007> .
17. Nahit Rizaner, Rustem Onkal, Scott P. Fraser, Alessandro Pristerá, Kenji Okuse, Mustafa B. A. Djamgoz. Intracellular calcium oscillations in strongly metastatic human breast and prostate cancer cells: control by voltage-gated sodium channel activity // *Eur Biophys J* 2016, 45(7):735-748. doi: 10.1007/s00249-016-1170-x. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/27665102/>
18. J. Cheng, J. Wen, N. Wang, C. Wang, Q. Xu, and Y. Yang, Ion Channels and Vascular Diseases, *Arterioscler. Thromb. Vasc. Biol.* 39, (2019) <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/31017824/> .
19. H. Li, W.-Y. Zhou, Y.-Y. Xia, J.-X. Zhang, Endothelial Mechanosensors for Atheroprone and Atheroprotective Shear Stress Signals, *J. Inflamm. Res.* 15 (2022) 1771–1783 <https://doi.org/10.2147/JIR.S355158>
20. Уварова І.В., Горбик П.П., Горобець С.В., Іващенко О.А., Ульянович Н.В. Наноматеріали медичного призначення, Київ, "Наукова думка", 2014, 414 стр. <http://www.materials.kiev.ua/science2.0/publications/edition.jsp?id=14> .
21. N. Nayerossadat, P. Ali, T. Maedeh, Viral and nonviral delivery systems for gene delivery, *Adv. Biomed. Res.* (2012). <https://doi.org/10.4103/2277-9175.98152>
22. S. Sawant, S.M. Patil, V. Gupta, N.K. Kunda, Microbes as Medicines: Harnessing the Power of Bacteria in Advancing Cancer Treatment, *Int. J. Mol. Sci.* 21 (2020) 7575. <https://doi.org/10.3390/ijms21207575> .
23. O. Gorobets, S. Gorobets, M. Koralewski, Physiological origin of biogenic magnetic nanoparticles in health and disease: from bacteria to humans, *Int. J. Nanomedicine.* Volume 12 (2017) 4371–4395. <https://doi.org/10.2147/IJN.S130565>.

24. Svitlana Gorobets, Oksana Gorobets, Iryna Sharai, Tatyana Polyakova, Vitalii Zablotskii / Gradient Magnetic Field Accelerates Division of E. coli Nissle 1917. Cells 2023, 12, 315. <https://doi.org/10.3390/cells12020315>

Інформаційні ресурси

1. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov>
2. <https://www.python.org/>
3. <https://www.geeksforgeeks.org/top-python-ide/>
4. <https://matplotlib.org/>
5. <https://numpy.org/>
6. <https://pandas.pydata.org/>
7. <https://scikit-learn.org/stable/>
8. <https://scipy.org/>
9. <http://www.biopython.org>
10. <https://magpylib.readthedocs.io/en/latest/>
11. https://docs.opencv.org/4.5.2/d6/d00/tutorial_py_root.html
12. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/>
13. <https://www.geeksforgeeks.org/top-python-ide/>
14. <https://towardsdatascience.com/10-machine-learning-methods-that-every-data-scientist-should-know-3cc96e0e0eee9>

Навчальний контент 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
	<i>Тема 1. Використання мови програмування Python для задач біотехнології та розробки ліків.</i>
1	Лекція 1. Огляд пакетів мови програмування python для задач біотехнології та розробки ліків. Інтегральні середовища розробки (ICP), (Integrated development environment – IDE): Pycharm Community, IDLE, Visual Studio Code, Atom, Sublime Text, Spyder, PyDev, Jupyter, Thonny, PyScripter. Література: базова [1-4], інформаційні джерела [1-3]
2	Лекція 2. Пакет matplotlib python для візуалізації та аналізу експериментальних даних в біотехнології, 3D графіки та діаграми. Література: базова [1-4], інформаційні джерела [4]
3	Лекція 3. Пакети python для задач регресійного аналізу: numpy, pandas, scikit-learn, scipy. Багатофакторна регресія, регресія Демінга (orthogonal distance regression). Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [5-8]
4	Лекція 4. Пакет scipy мови програмування python для задач біоінформатики. Література: базова [1-4], інформаційні джерела [8]
4	Лекція 5. Пакети мови програмування python для задач кластеризації в розробці ліків. Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [2-9]
6	Лекція 6. Методи машинного навчання для розробки ліків. Метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining). Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [2-9]

7	Лекція 7. Методи математичної статистики в розробці ліків. Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [2-9]
	<i>Тема 2. Моделювання систем таргетної доставки та процесу дифузії лікарських препаратів з використанням мови програмування python.</i>
8	Лекція 8. Моделювання систем таргетної доставки ліків з використанням пакету <code>magpylib</code> . Література: базова [1-5], інформаційні джерела [10]
9	Лекція 9. Моделювання дифузії лікарських препаратів з застосуванням пакету <code>py-pde</code> . Література: базова [1-4], інформаційні джерела [2-9]

Практичні заняття

Основні завдання циклу практичних занять:

- робота з пакетами мови програмування python, які використовуються для розробки ліків;
- алгоритми машинного навчання, які використовуються для розробки ліків.

№ з/п	Назва теми заняття
1	Практична робота 1 Інтегральні середовища розробки (ICP), (Integrated development environment – IDE): Pycharm Community, IDLE, Visual Studio Code, Atom, Sublime Text, Spyder, PyDev, Jupyter, Thonny, PyScripter. Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [1-3]
2	Практична робота 2 3D графіки та діаграми з застосуванням пакету <code>matplotlib</code> мови програмування python. Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [4]
3	Практична робота 3 Багатофакторна регресія, регресія Демінга (orthogonal distance regression). Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [4-8]
4	Практична робота 4 Підготовка даних для розрахунку фізико-хімічних властивостей білків. Розрахунок фізико-хімічних властивостей білків з застосуванням пакету <code>Biopython</code> . Література: базова [1-4], додаткова [1-4], інформаційні джерела [9]
5	Практична робота 5 Порівняння фізико-хімічних властивостей гомологічних білків з застосуванням пакетів <code>numru</code> , <code>scikit-learn</code> , <code>scipy</code> , <code>Biopython</code> . Література: базова [3], інформаційні джерела [9]
6	Практична робота 6 Використання пакету <code>scipy</code> мови python для завдання спеціальних функцій та задач статистики. Спеціальні тести для нормального розподілу. Порівняння двох вибірок, чи мають ці вибірки однакові статистичні властивості. Література: базова [3,4], інформаційні джерела [7,8]

7	Практична робота 7 Пакет <code>magruiib</code> для задач таргетної доставки ліків. Література: базова [3], інформаційні джерела [10]
8	Практична робота 8 Використання пакетів <code>scikit-learn</code> , <code>scipy</code> мови програмування <code>python</code> для задач кластеризації та розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Література: базова [3-5], інформаційні джерела [7,8]
9	Практична робота 9 МКР

6. Самостійна робота аспіранта

Самостійна робота аспіранта по дисципліні включає підготовку до аудиторних занять (24 години), модульної контрольної (4 години), підготовка до екзамену (30 годин) та самостійне вивчення певних тем, перелік яких наводиться нижче (56 години).

№ з/п	Назви тем і питань, що виносяться на самостійне опрацювання та посилання на навчальну літературу	Кількість годин СРС
1	Інтегральні середовища розробки IDLE, Visual Studio Code, Atom, Sublime Text, Spyder, PyDev, Jupyter, Thonny, PyScripter. Література: базова [3], інформаційні ресурси: [13]	7
2	Пакет <code>matplotlib</code> <code>python</code> для візуалізації та аналізу експериментальних даних в біотехнології, 3D графіки та діаграми. Література: базова [3], інформаційні ресурси: [4].	7
3	Пакети <code>python</code> для задач регресійного аналізу. Пакет <code>pandas</code> мови <code>python</code> для задач регресійного аналізу Література: базова [3], інформаційні ресурси: [6]	7
	Пакет <code>scikit-learn</code> мови <code>python</code> для задач регресійного аналізу Література: базова [3], інформаційні ресурси: [7]	7
	Пакет <code>scipy</code> мови <code>python</code> для задач регресійного аналізу Література: базова [3], інформаційні ресурси: [8]	7
4	Методи машинного навчання для розробки ліків. Алгоритм машинного навчання дерево рішень для розробки ліків.	7
	Алгоритм машинного навчання K-найближчих сусідів для розробки ліків Алгоритм машинного навчання випадковий ліс для розробки ліків	7
	Література: базова [3], інформаційні ресурси: [14]	7

Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Вивчення дисципліни «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» відбувається на лекційних та практичних заняттях. Наочність навчальних занять забезпечується використанням значної кількості ілюстративного матеріалу (схем, таблиць, слайдів). Під час викладання даної дисципліни викладач проводить опитування аспірантів для того, щоб визначити рівень засвоєння ними викладеного матеріалу, важливим є активність аспірантів, підготовка ними на протязі семестру коротких доповідей чи текстів по темі лекцій. Практичні заняття проходять з використанням комп'ютерної техніки та відповідного програмного забезпечення. Викладання дисципліни проводиться відповідно до рейтингової системи оцінювання. Рейтинг аспіранта з дисципліни складається з балів, що він отримує в процесі роботи на практичних заняттях та написання модульної контрольної роботи. Знання аспіранта отримані за семестр навчання оцінюються за 100 бальною системою оцінки. В процесі навчання аспіранти можуть отримувати додаткові бали за виконання додаткових завдань запропонованих викладачем.

Положення про рейтингову систему оцінювання з дисципліни «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» до даної робочої навчальної програми представлені в Додатку 1.

- *правила відвідування занять (як лекцій, так і практичних/лабораторних);*
- Відвідування лекцій та практичних занять, а також відсутність на них, не оцінюються. Однак, аспірантам рекомендується відвідувати заняття, оскільки на них викладається теоретичний матеріал та розвиваються навички, необхідні для формування компетентностей, визначених стандартом освіти. Система оцінювання орієнтована на отримання балів за активність аспіранта, а також виконання завдань, які здатні розвинути практичні уміння та навички. За об'єктивних причин (наприклад, хвороба, працевлаштування, міжнародне стажування тощо) навчання може відбуватися в он-лайн формі за погодженням із керівником курсу.
- *правила поведінки на заняттях (активність, підготовка коротких доповідей чи текстів, відключення телефонів, використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача чи в інтернеті тощо);*
- На аудиторних заняттях аспірант має поважати викладача та дисципліну, що він слухає. Виконувати елементарні правила та норми поведінки. Протягом заняття забороняється користуватися мобільними телефонами, окрім екстрених випадків. Норми етичної поведінки аспірантів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.
- *правила призначення заохочувальних та штрафних балів;*
- Заохочувальні бали здобувач вищої освіти отримує за поставлені ним запитання доповідачу під час роботи на лекціях, за виконання додаткових завдань, за опрацювання актуальної літератури по темі курсу, за активність при відповіді на поставлені викладачем запитання (по 1 балу), але не більше 10 балів.
Правила призначення заохочувальних та штрафних балів (штрафні бали та заохочувальні бали призначаються згідно підрозділу 5 цього силабусу).

- *політика дедлайнів та перескладань;*
Термін здачі кожного виду роботи обговорюється на занятті під час видачі завдання та залежить від типу роботи. Роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин, оцінюються на нижчу оцінку. Перескладання тем (модулів) відбувається за наявності поважних причин.
- *політика щодо академічної доброчесності;*
визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>. Використання додаткових джерел інформації під час оцінювання знань заборонено (у т.ч. мобільних пристроїв). Мобільні пристрої дозволяється використовувати лише під час он-лайн тестування та виконання розрахунків.

- Аспірант зобов'язаний зареєструватися на платформі дистанційного навчання Google Workspace for Education Fundamentals (в минулому G Suite For Education) на домені @LLL.kpi.ua та приєднатися до Google Класу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» за посиланням: <https://classroom.google.com/c/NjgwNzQ5NjAzODYw?cjc=imqz2vs>. Для цього аспіранту необхідно спочатку отримати акаунт в Google Workspace for Education Fundamentals на домені @LLL.kpi.ua. Для отримання акаунту в Google Workspace for Education Fundamentals на домені @LLL.kpi.ua необхідно заповнити Google форму: https://sikorsky-distance.kpi.ua/reg_gsuite/. Після реєстрації та модерації заявки аспіранта, адміністратор надішле аспіранту на пошту пароль та логін до акаунту, з яким аспірант зможе використовувати всі доступні інструменти та сервіси Google Workspace for Education Fundamentals. Google Workspace for Education Fundamentals – це пакет спеціалізованого хмарного програмного забезпечення, інструментів для спільної роботи та дистанційного навчання від компанії Google. Основна складова пакету – система управління навчанням Google Клас, яка дозволяє викладачу створювати навчальні класи, оцінювати завдання, надавати учням зворотній зв'язок, публікувати оголошення і поширювати навчальні матеріали. Викладач може бачити, хто виконав завдання, а хто ще продовжує над ним працювати, а також читати питання і коментарі учнів. Для приєднання до навчального «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» аспіранту потрібно перейти у Google Клас за посиланням <https://classroom.google.com/c/NjgwNzQ5NjAzODYw?cjc=imqz2vs>, натиснути зображення «+» у верхньому правому кутку браузера, вибрати «Приєднатися до класу» та ввести код курсу imqz2vs. Акаунти аспірантів, які приєдналися до Google Класу не з акаунту на домені @LLL.kpi.ua, будуть вилучатися з навчального курсу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» Google Класу тому, що автоматичний імпорт оцінок за тестування можливий виключно з акаунту на домені @LLL.kpi.ua. Система Google Клас автоматично надсилає кожному аспіранту бали по кожному з видів контролю на електронну пошту. Тому для ознайомлення з балами за кожен окремий вид контролю аспіранту необхідно змінити налаштування електронної пошти так, щоб ці електронні листи не потрапляли у спам. Всі виконані завдання для перевірки викладачем аспірант повинен завантажувати через систему Google Клас (результати виконання завдань, надіслані через телеграм канал перевірятися не будуть).
- Листування із аспірантами з організаційних питань буде здійснюватися через телеграм чат дисципліни.

Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Поточний контроль: робота на практичних заняттях (32 бали) та МКР (18 балів). Загальна сума балів за семестрову роботу – 50 балів. Докладніша інформація щодо поточного контролю та критеріїв оцінювання наведена в PCO з дисципліни (Додаток 1).

Модульна контрольна робота проводиться з метою контролю якості засвоєного аспірантами матеріалу та внесення відповідних коректив у проходження учбового процесу за результатами написання модульної контрольної роботи. Модульна контрольна робота представляє собою перелік з 6 теоретичних питань.

В процесі написання модульної контрольної роботи аспірант повинен показати всі отримані та засвоєні знання та мати можливість відповідати як на конкретні теоретичні питання так і вирішувати більш творчі завдання. Варіанти питань модульної контрольної роботи з дисципліни «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» представлено у Додатку 2.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання аспірантів з кредитного модуля «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів» відповідає розподілу навчального часу за видами занять і завдань з дисципліни згідно з робочим навчальним планом.

Календарний контроль: проводиться в кінці семестру.

Протягом семестру аспірант має змогу отримати максимально 50 балів.

Рейтинг аспіранта з кредитного модуля складається з балів, що він отримує за:

- виконання та захист 8 практичних робіт;
- написання модульної контрольної роботи.

Практичні роботи. Ваговий бал – 32. Максимальна кількість балів за всі практичні роботи дорівнює $4 \text{ бали} \times 8 = 32 \text{ бали}$.

Написання модульної контрольної роботи. Модульна контрольна робота складається з 6 теоретичних питань. Максимальна кількість балів за модульну контрольну роботу 18 балів. Максимальна кількість балів за одне теоретичне питання дорівнює 3 балам.

Детальна характеристика РСО наведена у Додатку 1.

Семестровий контроль: екзамен. Загальна сума балів на екзамені – 50 балів. Докладніша інформація щодо проведення та оцінювання наведена в РСО з дисципліни.

Екзамен оцінюється в 50 балів. Контрольне завдання іспиту складається з 5 запитань, кожне запитання оцінюється в 10 балів з переліку, що наданий у додатку 3 до робочої програми.

Умови допуску до семестрового контролю: написання МКР та захист практичних робіт.

Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Додаток 1

Рейтингова система оцінювання результатів навчання аспірантів з кредитного модуля курсу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів»

№ п/п	Вид контролю	Бал	Кількість	Сума балів
1	Виконання практичних робіт			
	- ваговий бал	4	8	32
2.	Модульна контрольна робота			
	-ваговий бал	18	1	18
3.	Екзамен	50	1	50
4.				100

Рейтинг студента з кредитного модуля складається з балів, що він отримує за: виконання та захист 8 практичних робіт;

написання модульної контрольної роботи.

Критерії нарахування балів.

1. Практичні роботи. Ваговий бал – 4. Максимальна кількість балів за всі практичні роботи дорівнює $4 \text{ балів} \times 8 = 32 \text{ бали}$.

бездоганна робота – 4 бали;

є певні недоліки у підготовці або виконанні роботи – 3 бали; є недоліки у підготовці та виконанні роботи – 1-2 бали; Робота не виконана або не захищена – 0 балів.

2. Написання модульної контрольної роботи. Ваговий бал – 18. Максимальна кількість балів за модульну контрольну роботу 18 балів.

Модульна контрольна робота складається з 6 теоретичних питань. Максимальна кількість балів за одне теоретичне питання дорівнює 3 балам: повну правильну відповідь студент отримує – 3 бали;

за правильну відповідь з незначними неточностями студент отримує – 2,5 бали; за правильну відповідь, але є деякі неточності студент отримує – 2 бали; за відповідь, в якій є суттєві неточності студент отримує – 1.5 балів; за неправильну відповідь студент отримує 0 балів.

Штрафні та заохочувальні бали за:

- участь у модернізації практичних робіт; виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни надається від 1 до 3 заохочувальних балів.

Екзамен оцінюється в 50 балів. Контрольне завдання цієї роботи складається з п'яти запитань з переліку, що наданий у додатку 3 до робочої програми.

Кожне запитання оцінюється в 10 балів за такими критеріями:

Кожне запитання оцінюється в 10 балів за такими критеріями:

повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації), надані відповідні обґрунтування та особистий погляд – 9-10 балів;

достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», або незначні неточності) – 7-8 балів;

неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки) – 6 балів;

незадовільна відповідь – 0-5 балів.

Додаток 2

Питання до модульної контрольної роботи з курсу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів»

1. Які інтегральні середовища розробки (ICP) для мови програмування python Ви знаєте?
2. Перелічте методи побудови 3D графіків та діаграм в пакеті matplotlib.
3. Які пакети мови програмування python використовуються для розв'язання задач регресійного аналізу?
4. Дайте визначення багатофакторній регресії.
5. Для яких експериментальних даних доцільно використовувати метод регресії Демінга (orthogonal distance regression)?
6. Які системи таргетної доставки ліків можливо моделювати з застосуванням пакету magpylib?
7. Які методи пакету scipy мови програмування python для задач біоінформатики Ви знаєте?
8. Які пакети мови програмування python та методи Ви знаєте для задач кластеризації в розробці ліків.
9. Які методи машинного навчання використовуються для розробки ліків.
10. Для яких задач використовується метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining)?
11. Які основні методи пакету ru-pde мови програмування python використовуються для розв'язання рівняння дифузії?

Додаток 3

Питання до екзамену з курсу «Прогрес біоінформатики в розробці лікарських препаратів»

1. Які інтегральні середовища розробки (ICP) для мови програмування python Ви знаєте?

2. Перелічте методи побудови 3D графіків та діаграм в пакеті matplotlib.
3. Які пакети мови програмування python використовуються для розв'язання задач регресійного аналізу?
4. Дайте визначення багатофакторній регресії.
5. Для який експериментальних даних доцільно використовувати метод регресія Демінга (orthogonal distance regression)?
6. Які системи таргетної доставки ліків можливо моделювати з застосуванням пакету magpylib?
7. Які методи пакету scipy мови програмування python для задач біоінформатики Ви знаєте?
8. Які пакети мови програмування python та методи Ви знаєте для задач кластеризації в розробці ліків.
9. Які методи машинного навчання використовуються для розробки ліків.
10. Для яких задач використовується метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining)?
11. Які основні методи пакету ru-pde мови програмування python використовуються для розв'язання рівняння дифузії?
12. Дайте визначення поліноміальної регресії.
13. Які бази даних по розробці лікарських препаратів Ви знаєте?

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено проф., д.т.н. Горобець Світланою Василівною.

Ухвалено кафедрою біоенергетики, біоінформатики та екобіотехнології (протокол №14 від 27 травня 2024 р.)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 19 від 28.06.2024)