



ПРОГРЕС БІОІНФОРМАТИКИ В РОЗРОБЦІ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти *Третій (освітньо-науковий)*

Галузь знань	G Інженерія, виробництво та будівництво
Спеціальність	G21 Біотехнології та біоінженерія
Освітня програма	Біотехнології
Статус дисципліни	Вибіркова
Форма навчання	Денна
Рік підготовки, семестр	2 курс, весняний семестр
Обсяг дисципліни	4 кредити, 120 годин, 16 годин лекції, 14 годин практичні заняття, самостійна робота 90 години
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Залік / модульна контрольна робота
Розклад занять	https://schedule.kpi.ua
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: д.т.н., проф., проф. Горобець Світлана Василівна Практичні: д.т.н., проф., проф. Горобець Світлана Василівна Листування зі студентами з організаційних питань буде здійснюватися через WhatsApp 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. У сучасних умовах стрімкого розвитку біотехнологій та цифрової медицини біоінформатика стала невід'ємною складовою процесу розробки нових лікарських засобів. Застосування методів біоінформатики дозволяє суттєво прискорити та здешевити етапи ідентифікації терапевтичних мішеней, комп'ютерного дизайну ліків, віртуального скринінгу, прогнозування токсичності та побічних ефектів.

Для аспірантів, які проводять наукові дослідження у сфері фармакології, молекулярної біології, біотехнології чи медицини, знання сучасних біоінформаційних інструментів відкриває

нові можливості інтеграції обчислювальних методів у лабораторну практику. Зокрема, такі підходи як молекулярне моделювання, аналіз структур білків, фармакогеноміка та машинне навчання виявляються надзвичайно ефективними у формуванні гіпотез, плануванні експериментів і аналізі великих обсягів біомедичних даних.

Крім того, вивчення дисципліни є важливим з огляду на світові тренди у розвитку персоналізованої медицини, де лікування підбирається з урахуванням індивідуального генетичного профілю пацієнта. Біоінформатика є ключем до реалізації цього підходу, а також до створення більш ефективних та безпечних препаратів на основі даних *in silico*.

Таким чином, дисципліна формує у майбутніх науковців міждисциплінарне бачення, критичне мислення та практичні навички роботи з біоінформаційними платформами, що є незамінними для сучасного фахівця у галузі наукових досліджень, фармацевтики та медичних технологій.

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.

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.

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.

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.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів компетентностей:

- ФК 01. Здатність до перегляду існуючих концепцій сучасної біотехнології та біоінженерії шляхом критичного осмислення і адаптації новостворених методів та технологій, шляхом генерування оригінальних гіпотез.
- ФК 02. Здатність виконувати оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які створюють нові знання у сфері біотехнологій та біоінженерії та дотичних до неї міждисциплінарних напрямів і можуть бути опубліковані у провідних наукових виданнях з біотехнологій та суміжних галузей.
- ФК 03. Здатність критично аналізувати, оцінювати і синтезувати нові та комплексні ідеї у сфері біотехнології та біоінженерії та з дотичних міждисциплінарних питань.

- ФК 06. Здатність застосовувати сучасні методи та інструменти досліджень, і цифрові технології, бази даних та інші електронні ресурси, спеціалізоване програмне забезпечення у науковій та викладацькій діяльності.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі програмні результати навчання:

- ПРН 03. Знання і розуміння проблемних питань сучасної біотехнології (в тому числі і на межі предметних галузей) та біоінженерії для створення новітніх біотехнологій.
- ПРН 04. Використовувати сучасні принципи, концепції, теорії, наукові дані фізіології, біохімії, генетики, інших наук для вдосконалення біологічних агентів і регуляції біотехнологічних процесів.
- ПРН 05. Мати передові концептуальні та методологічні знання з біотехнологій та біоінженерії і на межі предметних галузей, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій.
- ПРН 07. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.

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. Хемоінформатика та інтелектуальний аналіз молекулярних структур.

Лекція 1. Сучасна парадигма Drug Discovery: роль біоінформатики та штучного інтелекту (ШІ) у розробці ліків.

Лекція 2. Цифровізація хімічного простору: методи молекулярної репрезентації в біоінформатиці.

Лекція 3. Біоінформаційні стратегії кодування молекул для навчання предиктивних алгоритмів.
Лекція 4. Прогресивні методи QSAR-моделювання: прогнозування фармакологічного профілю *in silico*.

Лекція 5. Обчислювальна структурна біологія: аналіз архітектури активних центрів для раціонального дизайну ліків.

Тема 3. Біоінформаційні аспекти прецизійної медицини та керованої доставки лікарських форм

Лекція 6. Обчислювальні інструменти моделювання магнітних пристроїв для біомедичної аналітики (застосування пакетів NumPy, Magpylib мови програмування Python).

Лекція 7. Інтелектуальні терапевтичні системи: штучні та біогенні магнітні наночастинки, мікрофлюїдні пристрої та магнітогенетичний інструментарій.

Лекція 8. Магнітогенетика: дистанційна активація клітинних функцій, нові методи терапії та діагностики в магнітних полях. Методи магнітокерованої доставки генів та ліків. Природне та штучне магнітомічення клітин бактерій для цільової доставки ліків.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Somara, S., Joshi, A.M., Mitra, K. *et al.* Artificial Intelligence in Biotechnology and Pharmaceuticals: Evolution, Applications, and Regulatory Frontiers. *Curr Stem Cell Rep* **11**, 9 (2025). <https://doi.org/10.1007/s40778-025-00249-y>
2. Mak K-K, Pichika MR. Artificial Intelligence in Drug Discovery and Development: A Comprehensive Review of Data-Driven and Machine Learning Approaches. *ACS Omega* 2024. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.5c00549>
3. An automated framework for developing predictive QSAR models. *Journal of Cheminformatics* 2018, 10:1. <https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13321-017-0256-5>
4. Magpylib: A free Python package for magnetic field computation. *SoftwareX* 2020, 11:100466. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352711020300170>

Додаткова література:

1. Jiang J., Li Y., Cao S., et al. Artificial intelligence in bioinformatics: a survey // *Brief Bioinform.* – 2025. – Vol. 26, No. 6. – Article bbaf576. DOI: 10.1093/bib/bbaf576. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12596291/>
2. From Lab to Clinic: How AI Is Reshaping Drug Discovery. *Cureus* 2024, 16(8):e67729. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12298131/>
3. Editorial: Artificial Intelligence, Machine Learning, and Deep Learning in Bioinformatics and Drug Repurposing for Precision Medicine. *Frontiers in Genetics* 2022. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC8969764/>
4. AI-enabled drug and molecular discovery: Current trends and future perspectives. *Discover Molecules* 2025. <https://link.springer.com/article/10.1007/s44345-025-00037-5>
5. Molecular representations in bio-cheminformatics and drug design. *Memetic Computing* 2024, 16:337-361. <https://link.springer.com/article/10.1007/s12293-024-00414-6>
6. Reconstruction of lossless molecular representations from 2D molecular fingerprints. *Journal of Cheminformatics* 2023,15:26 <https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13321-023-00693-0>
7. Comparative analysis of molecular fingerprints in prediction of drug combination effects. *Briefings in Bioinformatics* 2021, 22(6). <https://academic.oup.com/bib/article/22/6/bbab291/6353238>
8. Effectiveness of molecular fingerprints for exploring the chemical space of natural products. *Journal of Cheminformatics* 2024, 16:30. <https://link.springer.com/article/10.1186/s13321-024-00830-3>
9. SimSon: leveraging contrastive learning of SMILES representations. *Digital Discovery* 2024. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12124188/>
10. Comparative analysis of molecular feature representations for taste class prediction. *Food Chemistry* 2023. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10529232/>

11. A Beginner's Guide to (Q)SAR Modeling: From Molecular Descriptors to Machine Learning. Neovarsity 2024. <https://neovarsity.org/blogs/cheminformatics-qsar-beginner-guides>
12. Free QSAR-ready workflow for the DataWarrior program enables predictions for unmeasured compounds. Journal of Cheminformatics 2024, 16:17. <https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13321-024-00814-3>
13. Diving Deep into QSAR with the ChEMBL Dataset: Predicting IC50 for Drug Discovery. Medium 2024. <https://medium.com/@ayushgharat234/diving-deep-into-qsar-with-the-chembl-dataset-predicting-ic50-for-drug-discovery-374666498de5>
14. RCSB Protein Data Bank (RCSB.org): delivery of experimentally-determined PDB structures. Nucleic Acids Research 2023, 51(D1):D488-D508. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC9825554/>
15. AlphaFold Protein Structure Database in 2024: providing structure coverage for over 214 million protein sequences. Nucleic Acids Research 2024, 52(D1):D368-D375. <https://academic.oup.com/nar/article/52/D1/D368/7331137>
16. Mathematical Modeling of Targeted Drug Delivery Using Magnetic Nanoparticles during Intraperitoneal Chemotherapy. Pharmaceutics 2022, 14(2):324. <https://www.mdpi.com/1999-4923/14/2/324>
17. Gorobets S.V. et al. Biogenic magnetic nanoparticles in human organs and tissues // Prog. Biophys. Mol. Biol. 2018. Vol. 135. P. 49–57. doi.org/10.1016/j.pbiomolbio.2018.01.010.
18. Mikesheyna H.I. et al. Influence of Biogenic Magnetic Nanoparticles on the Vesicular Transport // Acta Phys. Pol. A. 2018. Vol. 133, № 3. P. 731–733. DOI:10.12693/APhysPolA.133.731.
19. Gorobets S. et al. Gradient Magnetic Field Accelerates Division of E. coli Nissle 1917 // Cells. 2023, 12, № 2. P. 315. doi:10.3390/cells12020315. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/36672251/>
20. S. Gorobets, O. Gorobets, L. Kuzminykh Control of magnetic susceptibility of probiotic strain *Lactobacillus R GG* Nova Biotech et Chimica 2023 Vol. 22, №1, doi.org/10.34135/nbc.1384.
21. Del Sol-Fernández S, Martínez-Vicente P, et al. Magnetogenetics: remote activation of cellular functions triggered by magnetic switches. Nanoscale. 2022; 14:2091–118. doi: 10.1039/D1NR06303K

Інформаційні ресурси

- [1] ChEMBL Database - Large-scale Bioactivity Database. European Bioinformatics Institute. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
- [2] PubChem - Open Chemistry Database. National Center for Biotechnology Information. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- [3] RDKit: Open-Source Cheminformatics Software. <https://www.rdkit.org/>
- [4] NumPy Documentation - The Fundamental Package for Scientific Computing with Python. <https://numpy.org/doc/>
- [5] Open Babel: The Open Source Chemistry Toolbox. <http://openbabel.org/>
- [6] DeepChem - Deep Learning for Drug Discovery. <https://deepchem.io/>
- [7] OECD QSAR Toolbox. <https://www.oecd.org/en/topics/policy-issues/qsar.html>
- [8] EPA CompTox Chemicals Dashboard. <https://comptox.epa.gov/dashboard/>
- [9] RCSB Protein Data Bank. <https://www.rcsb.org/>
- [10] UniProt - Universal Protein Resource. <https://www.uniprot.org/>
- [11] AlphaFold Protein Structure Database. <https://alphafold.ebi.ac.uk/>
- [12] Magpylib Documentation - Python package for calculating magnetic fields. <https://magpylib.readthedocs.io/>
- [13] Magpylib GitHub Repository. <https://github.com/magpylib/magpylib>

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

Навчальний контент

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. Хемоінформатика та інтелектуальний аналіз молекулярних структур.</i>	
1	Лекція 1. Сучасна парадигма Drug Discovery: роль біоінформатики та ШІ у розробці ліків. Література: базова [1, 2], додаткова [1-4], інформаційні джерела [1-11].
2	Лекція 2. Цифровізація хімічного простору: методи молекулярної репрезентації в біоінформатиці. Література: базова [1-2], додаткова [5-7], інформаційні джерела [3-5]
3	Лекція 3. Біоінформаційні стратегії кодування молекул для навчання предиктивних алгоритмів. Література: базова [1-2], додаткова [8-10], інформаційні джерела [3-6]
4	Лекція 4. Прогресивні методи QSAR-моделювання: прогнозування фармакологічного профілю <i>in silico</i> . Література: базова [3], додаткова [11-13], інформаційні джерела [1, 7-8].
5	Лекція 5. Обчислювальна структурна біологія: аналіз архітектури активних центрів для раціонального дизайну ліків. Література: базова [3], додаткова [14, 15], інформаційні джерела [2, 9, 11].
<i>Тема 3. Біоінформаційні аспекти прецизійної медицини та керованої доставки лікарських форм</i>	
6	Лекція 6. Обчислювальні інструменти моделювання магнітних пристроїв для біомедичної аналітики (застосування пакетів NumPy, Magpylib мови програмування Python). Література: базова [4], додаткова [16], інформаційні джерела [12-13].
7	Лекція 7. Інтелектуальні терапевтичні системи: штучні та біогенні магнітні наночастинки, мікрофлюїдні пристрої та магнітогенетичний інструментарій. Література: базова [4], додаткова [17-20], інформаційні джерела [12-13].
8	Лекція 8. Магнітогенетика: дистанційна активація клітинних функцій, нові методи терапії та діагностики в магнітних полях. Методи магнітокерованої доставки генів та ліків. Природне та штучне магнітомічення клітин бактерій для цільової доставки ліків. Література: базова [5], додаткова [21], інформаційні джерела [12-13].

Практичні заняття

Основні завдання циклу практичних занять:

- робота з програмними пакетами, які використовуються в біотехнології;
- практична робота з сучасними базами даних молекулярної біології.

№ з/п	Назва теми заняття
1	Практична робота 1. Генеративний штучний інтелект (ШІ) та промпт-інжиніринг для розв'язання біомедичних і фармацевтичних задач. Література: базова [1,2], додаткова [1-3]
2	Практична робота 2. Цифрова репрезентація хімічних сполук: робота з молекулярними графами та базовими фізико-хімічними дескрипторами. Література: базова [1, 2], додаткова [5, 7], інформаційні джерела [3, 5-6].
3	Практична робота 3. Обчислювальне профілювання бібліотек сполук: дескриптори та молекулярні відбитки (molecular fingerprints). Література: базова [1, 2], додаткова [8-10], інформаційні джерела [3, 7-8].
4	Практична робота 4. Предиктивна біоінформатика: побудова QSAR-моделей на основі даних ChEMBL та інтерпретація структурних чинників активності. Література: базова [3], додаткова [14, 15], інформаційні джерела [2, 9-11].

5	Практична робота 5. Обчислювальне картування активних центрів: ідентифікація та аналіз геометрії сайтів зв'язування для раціонального дизайну ліків. Література: базова [3], додаткова [14-15], інформаційні джерела [1, 3, 8, 9].
6	Практична робота 6. Розрахунок магнітних систем з використанням пакетів NumPy, Magpylib мови програмування Python для задач таргетної доставки лікарських форм. Література: базова [4], додаткова [16], інформаційні джерела [12-13].
7	Практична робота 9. МКР.

Самостійна робота аспіранта

Самостійна робота аспіранта по дисципліні включає підготовку до аудиторних занять (74 години), модульної контрольної (4 години), підготовка до заліку (6 годин).

Політика та контроль

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 оцінюється. 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).

- При виконанні індивідуальних самостійних завдань не наводити у списку використаної літератури публікації, співавторами яких є співробітники установ країни-агресора.

- 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 (72 бали) та МКР (28 балів). Загальна сума балів за семестрову роботу – 100 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 4 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 100 балів.

Рейтинг модуля складається з балів, що він отримує за:

- виконання та захист 6 практичних робіт;
- написання модульної контрольної роботи.

Практичні роботи. Ваговий бал – 72. Максимальна кількість балів за всі практичні роботи дорівнює $12 \text{ балів} \times 6 = 72 \text{ бали}$.

Написання модульної контрольної роботи. Модульна контрольна робота складається з 4 теоретичних питань. Максимальна кількість балів за модульну контрольну роботу 28 балів. Максимальна кількість балів за одне теоретичне питання дорівнює 7 бали.

Детальна характеристика РСО наведена у Додатку 1.

Семестровий контроль: Залік. Загальна сума балів на заліку – 100 балів. Докладніша інформація щодо проведення та оцінювання наведена в РСО з дисципліни.

Залік оцінюється в 100 балів. Контрольне завдання заліку складається з 5 запитань, кожне запитання оцінюється в 20 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	12	6	72
2.	Модульна контрольна робота			
	-ваговий бал	28	1	28
4.	Всього			100

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

- виконання та захист 6 практичних робіт;
- написання модульної контрольної роботи.

Критерії нарахування балів.

Практичні роботи. Ваговий бал – 12:

бездоганна робота – 12 балів;

- є певні недоліки у підготовці або виконанні роботи – 8-10 балів;
- є недоліки у підготовці та виконанні роботи – 6-7 балів;
- робота не виконана або не захищена – 1-5 балів.

Максимальна кількість балів за всі практичні роботи дорівнює $12 \text{ балів} \times 6 = 72 \text{ бали}$.

Написання модульної контрольної роботи. Ваговий бал – 28. Максимальна кількість балів за модульну контрольну роботу 28 балів.

Модульна контрольна робота складається з 4 теоретичних питань. Максимальна кількість балів за одне теоретичне питання дорівнює 7 балам:

- За повну правильну відповідь студент отримує – 7 балів;
- за правильну відповідь з незначними неточностями студент отримує – 5 бали;
- за правильну відповідь, але є неточності студент отримує – 3 бали;
- за відповідь, в якій є суттєві неточності студент отримує – 1 бал;
- 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 5 заохочувальних балів.

Залік оцінюється в 100 балів. Контрольне завдання цієї роботи складається з п'яти запитань з переліку, що наданий у додатку 3 до робочої програми.

Кожне запитання оцінюється в 20 балів за такими критеріями:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації), надані відповідні обґрунтування та особистий погляд – 18-20 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», або незначні неточності) – 15-17 балів;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки) – 12 балів;
- незадовільна відповідь – 0-11 балів.

Додаток 2

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

1. Яка роль біоінформатики в фармацевтичних дослідженнях?
2. Наведіть джерела даних для розробки лікарських препаратів.
3. Перелічте методи побудови 3D графіків та діаграм в пакеті matplotlib.
4. Які пакети мови програмування python використовуються для розв'язання задач регресійного аналізу?
5. Дайте визначення багатофакторній регресії.
6. Для яких експериментальних даних доцільно використовувати метод регресії Демінга (orthogonal distance regression)?
7. Які системи таргетної доставки ліків можливо моделювати з застосуванням пакету magpylib?
8. Які методи пакету scipy мови програмування python для задач біоінформатики Ви знаєте?
9. Які пакети мови програмування python та методи Ви знаєте для задач кластеризації в розробці ліків?
10. Які пакети мови програмування python та методи Ви знаєте для задач класифікації в розробці ліків?
11. Які методи машинного навчання використовуються для розробки ліків?
12. Для яких задач використовується метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining)?
13. Дайте визначення поліноміальної регресії.
14. Які бази даних по розробці лікарських препаратів Ви знаєте?
15. Опишіть сучасні тенденції в методах пошуку мішеней для ліків.

16. Для розрахунку яких математичних дескрипторів біомолекул використовується пакет Biopython?
17. Наведіть ключові етапи QSAR-аналізу.
18. Опишіть основні етапи у методології машинного навчання, яка використовується у відкритті ліків.
19. Дайте визначення термінам магнітогенетика, оптогенетика, електрогенетика.
20. Для чого використовуються штучні магнітні наночастинки в молекулярній медицині?
21. Які клітини людини та тварин синтезують біогенні магнітні наночастинки?
22. Чи всі одноклітинні організми мають на генетичному рівні механізм біомінералізації біогенних магнітних наночастинок?
23. Сформулюйте основну зміну парадигми Drug Discovery під впливом штучного інтелекту порівняно з традиційними методами "проб та помилок".
24. Яку роль відіграє біоінформатика на етапі ідентифікації та валідації біологічної мішені?
25. Опишіть лінійну нотацію SMILES: принципи кодування атомів, зв'язків та циклічних структур.
26. Порівняйте SMILES та InChI: у чому полягає перевага стандарту InChI для хемоінформатики?
27. Молекулярний граф як метод репрезентації: що є вузлами та ребрами у такій моделі і які властивості сполуки вона дозволяє описати?
28. Що таке молекулярні дескриптори? Наведіть приклади фізико-хімічних дескрипторів (правило Ліпінського).
29. Поясніть принцип роботи молекулярних відбитків (Molecular Fingerprints). Чим відрізняються структурні ключі (напр. MACCS) від хешованих відбитків (напр. Morgan/ECFP)?
30. Що таке "хімічний простір" і якими методами здійснюється його цифровізація для машинного навчання?
31. Основні засади QSAR: поясніть залежність між біологічною активністю та дескрипторами структури.
32. База даних ChEMBL: яку інформацію вона надає для побудови предиктивних моделей активності сполук?
33. Валідація QSAR-моделей: назвіть основні метрики якості (R^2 , RMSE, крос-валідація).
34. Промпт-інжиніринг у фармацевтиці: як правильно сформулювати запит до генеративного ШІ для пошуку потенційних інгібіторів певного класу?
35. Інтерпретація структурних чинників активності: як зрозуміти, які саме фрагменти молекули відповідають за її фармакологічний ефект у QSAR-моделі?
36. У чому полягає стратегія "від геному до ліків"? Опишіть етапи біоінформаційного пошуку мішеней.
37. Валідація мішені (Target Validation): які обчислювальні методи підтверджують зв'язок між білком і захворюванням?
38. Банк даних білків (PDB): структура файлу .pdb та інформація, яку він містить про тривимірну архітектуру біополімерів.
39. Множинне вирівнювання послідовностей (MSA): як аналіз консервативних ділянок допомагає ідентифікувати активний центр білка?
40. Аналіз архітектури активного центру: які геометричні та фізико-хімічні характеристики сайту зв'язування є критичними для дизайну ліків?
41. Раціональний дизайн ліків (Structure-Based Drug Design): як знання 3D-структури мішені допомагає оптимізувати ліганд?
42. Ідентифікація "кишень" (pockets) зв'язування: за якими алгоритмами здійснюється обчислювальне картування поверхні білка?

43. Концепція прецизійної медицини: як біоінформатика допомагає адаптувати терапію під генетичний профіль пацієнта?
44. Магнітна таргетна доставка ліків: поясніть фізичний принцип керування лікарською формою за допомогою зовнішнього поля.
45. Використання бібліотеки Magpylib на Python: для яких задач моделювання магнітних систем вона призначена?
46. Штучні магнітні наночастинки: які властивості (розмір, магнітна сприйнятливність) визначають їх ефективність як носіїв ліків?
47. Мікрофлюїдні пристрої в біомедицині: як обчислювальне моделювання допомагає оптимізувати розділення клітин або сепарацію магнітних наночастинок?
48. Магнітогенетичний інструментарій: як зовнішнє магнітне поле може активувати специфічні клітинні процеси?
49. Біоінформатика природних магнітних систем: що можна запозичити у магнітотаксисних бактерій для розробки систем доставки ліків?
50. Інтелектуальні терапевтичні системи: визначення та роль зворотного зв'язку у керованій доставці.
51. Моделювання взаємодії "магнітне поле – біосистема": назвіть основні ..напрямки досліджень з моделювання *in silico* (за даними лекції 7-8).

Додаток 3

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

1. Визначте роль біоінформатики на різних етапах розробки лікарських засобів (від ідентифікації мішені до клінічних випробувань).
2. Порівняйте традиційні методи розробки ліків та підходи *in silico*: переваги, недоліки та економічна ефективність.
3. Наведіть основні джерела біомедичних даних (ChEMBL, PubChem, PDB) та їхнє призначення в біоінформатиці.
4. Які можливості відкриває застосування генеративного штучного інтелекту та промпт-інжинірингу в біомедичних дослідженнях?
5. Опишіть етапи методології машинного навчання (ML Pipeline) у контексті пошуку нових активних сполук.
6. Що таке молекулярна репрезентація? Поясніть різницю між 1D, 2D та 3D дескрипторами.
7. Дайте визначення та наведіть приклади символьних репрезентацій молекул (SMILES, InChI).
8. Що таке молекулярні «відбитки» (Fingerprints) і як вони використовуються для розрахунку хімічної подібності?
9. QSAR-аналіз: основні етапи побудови моделі та критерії її валідації.
10. Поясніть концепцію «простору хімічних сполук» (Chemical Space) та методи його візуалізації.
11. Розрахунок «важливості ознак» (Feature Importance) у QSAR-моделях: навіщо це потрібно розробнику ліків?
12. Визначення ADMET-профілю сполуки за допомогою обчислювальних методів.
13. Сучасні тенденції в ідентифікації та валідації біологічних мішеней: від геноміки до протеоміки.
14. Формат PDB (Protein Data Bank): структура файлу та використання в молекулярному моделюванні.
15. Обчислювальне картування активних центрів: методи визначення сайтів зв'язування на поверхні білка.

16. Роль множинного вирівнювання послідовностей (Clustal Omega) у порівняльному аналізі білків-мішеней.
17. Для яких задач у розробці ліків використовується метод приєднання сусідів (Neighbor-Joining) та побудова філогенетичних дерев?
18. Поняття раціонального дизайну ліків (Structure-Based Drug Design) на основі архітектури активного центру.
19. Перелічте основні спеціалізовані бібліотеки Python для біоінформатики (Biopython, RDKit, Scipy) та їхні функції.
20. Регресійний аналіз: відмінності між лінійною, багатофакторною та поліноміальною регресією в прогнозуванні біоактивності.
21. У яких випадках доцільно використовувати регресію Демінга (orthogonal distance regression) при аналізі експериментальних даних?
22. Задачі кластеризації (K-means, ієрархічна кластеризація) у процесі відбору перспективних сполук (Lead Optimization).
23. Задачі класифікації в біоінформатиці: прогнозування токсичності та механізму дії ліків.
24. Застосування пакету magpylib для моделювання систем магнітної таргетної доставки ліків.
25. Використання numpy для математичного опису та розрахунку конфігурацій магнітних сепараторів і концентраторів клітин.
26. Поясніть фізико-біологічний зміст термінів: магнітогенетика, оптогенетика, електрогенетика.
27. Штучні магнітні наночастинки як інструменти дистанційного керування внутрішньоклітинними процесами.
28. Біогенні магнітні наночастинки: які клітини людини їх синтезують та як їх можна використовувати при розробці ліків?
29. Проблема біомінералізації в одноклітинних організмів: генетичний аспект та використання в прецизійній медицині.
30. Мікрофлюїдні пристрої в біомедицині: обчислювальне моделювання процесів сепарації клітин та ДНК.
31. Яка роль біоінформатики в фармацевтичних дослідженнях?
32. Які інтегральні середовища розробки (ICP) для мови програмування python Ви знаєте?
33. Перелічте методи побудови 3D графіків та діаграм в пакеті matplotlib.
34. Для розрахунку яких математичних дескрипторів біомолекул використовується пакет Biopython?
35. Наведіть ключові етапи QSAR-аналізу.
36. Опишіть основні етапи у методології машинного навчання, яка використовується у відкритті ліків.
37. Дайте визначення термінам магнітогенетика, оптогенетика, електрогенетика.
38. Для чого використовуються штучні магнітні наночастинки в молекулярній медицині?
39. Чи всі одноклітинні організми мають на генетичному рівні механізм біомінералізації біогенних магнітних наночастинок?

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

складено д.т.н., проф. Горобець С.В.

Ухвалено кафедрою біоенергетики, біоінформатики та екобіотехнології (протокол №19 від 24.06.2026).

Погоджено Методичною комісією ФБТ (протокол №6 від 26.06.2026 р.)