

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана

з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«___» _____ 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хемоінформатика

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність **102 Хімія**

освітній рівень **магістр**

освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**

вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання

денна

Навчальний рік

2022/2023

Семестр

третій

Кількість кредитів ECTS

6

**Мова викладання, навчання
та оцінювання**

українська

Форма заключного контролю

екзамен

Викладач: д.х.н., проф. Волочнюк Д.М., д.х.н., проф. Рябухін С. В.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Волочнюк Д.М., д.х.н., проф. Рябухін С. В.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії


_____ (Рябухін С.В.)

Протокол №7 від «19» серпня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол №1 від «9» вересня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____  (Русінчук Н. М.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Метою дисципліни є ознайомлення студентів з предметом «Хемоінформатика» та підготувати студентів до вирішення завдань за допомогою використання сучасних інформаційних технологій та методів молекулярного моделювання в хімії. В результаті освоєння даної дисципліни повинні бути сформовані уявлення про предмет хемоінформатики, її основних поняттях, методах та підходах, а також можливості використання її методів та підходів для науково-практичних цілей: оперування хімічними базами даних, передбачення фізико-хімічних та спектральних властивостей сполук, передбачення біологічної активності сполук, дизайн матеріалів із заданими властивостями.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

фундаментальні основи загальної, неорганічної та органічної хімії, біохімії, молекулярної біології, фізичної хімії та супрамолекулярної хімії, а також основ фізичних методів дослідження.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними базами даних в галузі хімії і біології, іншими Інтернет-ресурсами.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс направлений на опанування теоретичного знання та на використання програмного забезпечення для створення та оперування з хімічними базами даних; дизайну та створенню бібліотек для віртуального та високоефективного скринінгу; побудові моделей, що мають передбачувальні властивості щодо біологічної активності, біодоступності, токсичності та інших властивостей. Особлива увага в курсі буде приділятися: (а) представленні хімічних об'єктів; (б) представленні хімічних реакцій; (в) хімічним базам даних; (г) дизайну бібліотек; (д) молекулярним дескрипторам; (е) концепції хімічного простору; (є) моделюванні "структура-властивість".

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліни має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

ІК. Здатність самостійно ставити та розв'язувати на інноваційному рівні наукові та науково-технічні задачі проблеми у галузі прикладної фізики, нанофізики, наноматеріалознавства та високих технологій, пов'язані із виготовленням, аналізом властивостей, використанням наноматеріалів, проектування та виготовлення наносенсорних систем, що передбачає застосування теоретичних знань та навичок з фізики, математики, інженерії, програмування, вибраних розділів хімії та біології.

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).

ЗК12. Здатність працювати автономно.

ЗК13. Здатність до активного збереження довкілля.

- ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.
- ФК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
- ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
- ФК3. Здатність організувати, планувати та реалізувати хімічний експеримент.
- ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
- ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
- ФК6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
- ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).
- ФК8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.
- ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	Знати: 1.1. Основні поняття, визначення, методи та підходи, що використовуються в хемоінформатиці; методи хемоінформатики, потрібні на вирішення тих чи інших завдань у хімії.	Лекції	Контрольні роботи	4%
	1.2. Способи представлення хімічних даних; методи здійснення пошуку в хімічних базах даних; основні хімічні бази даних, що використовуються в різних наукових цілях, та методи роботи з ними	Лекції	Контрольні роботи	4%
	1.3. Основні дескриптори, що використовуються в хемоінформатиці	Лекції	Контрольні роботи	4%
	1.4. Методи теоретичного створення та відбору хімічних сполук для проведення біологічного скринінгу; базовий алгоритм віртуального скринінгу хімічних сполук, основні фільтри, що використовуються у створенні лікарських засобів.	Лекції	Контрольні роботи	4%
	1.5. Способи побудови SAR/QSAR залежностей та мати уявлення про використання методів інтелектуального аналізу даних для цього	Лекції	Контрольні роботи	4%
2.	Вміти: 2.1. Створювати власні бази даних, оперувати ними, проводити пошук у них, готувати та курирувати дані.	Практичні заняття	Контрольні роботи	20%
	2.2. Використовувати дескрипторне уявлення хімічного простору для пошуку речовин з необхідними властивостями, вміти обчислювати основні дескриптори та розуміти їх зміст.	Практичні заняття	Контрольні роботи	20%
	2.3. Будувати найпростіші залежності SAR/QSAR/QSPR, визначати їхню статистичну значимість; використовувати методи SAR/QSAR/QSPR у створенні речовин із заданими властивостями.	Практичні заняття	Контрольні роботи	20%
3.	Комунікація: 3.1. Працювати в групі на семінарах та практичних роботах.	Практичні заняття	Звіти	10%
4.	Автономність та Відповідальність: 4.1. Самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	Самостійна робота	Контрольна робота	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1	2	3	4
1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+
2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	+
3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.		+	+	+
4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.		+	+	+
5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	+
6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+
7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.			+	+
8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.			+	
9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+	+	+
10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.		+	+	+
11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.		+	+	+
12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.		+	+	+
13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.		+	+	+
14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.			+	+
15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 2. – 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 2. – 12 балів
3. Модульна контрольна робота 3 – РН 2. – 12 балів
4. Підсумкова контрольна робота – РН 1. – 12 балів
5. Практичний звіт – РН 3. – 6 балів
6. Домашня контрольна робота. – РН 4. – 6 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 36 балів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Оцінювання роботи студента з рішення задач проводиться на практичних заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

№ п/п	Номер і назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
1	Тема 1. Вступ. Предмет хемоінформатики. Історія розвитку хемоінформатики. Введення у дисципліну. Основні проблеми хімії. Пряме та зворотне завдання моделювання. Їхні рішення. Призначення хемоінформатики. Визначення хемоінформатики. Хемоінформатика як наукова дисципліна. Хемоінформатика як дисципліна теоретичної хімії.	2		
2	Тема 2. Представлення хімічних об'єктів. Представлення молекул. Типові представлення молекул у хімії (структурна формула, хімічна формула, тривіальне ім'я). Особливості представлення у хемоінформатиці. Лінійні уявлення (імена, WLN, SMILES, SLN, InChI). Представлення у вигляді молекулярних графів. Бітові рядки (структурні ключі, відбитки пальців, хешовані відбитки пальців). Матричне представлення, види матриць. Табличне представлення. Тривимірні представлення. Координати атомів. Поверхні. Види	4		

	поверхонь, наприклад ван-дер-ваальсова поверхня, поверхня Конноллі, доступна розчиннику поверхня, поверхня виключеного розчинника, поверхня порожнини ферменту. Структури Маркуша.			
	Практичне заняття 2. Типові формати файлів (MDL, Sybyl, PDB, sdf, rtf). Конвертація між уявленнями. Конверсія структура-ім'я та ім'я-структура. Конверсія структури в лінійні уявлення. 2D-3D конвертація. Ознайомлення за програмними пакетами MDL ISIS, ChemAxon, Marvin (from ChemAxon), ChemOffice. Розгляд проблеми представлення діастереомерів та енантіомерів у форматі SMILES.		2	
	Самостійна робота 2. Опанування програмних пакетів MDL ISIS, ChemAxon, Marvin (from ChemAxon), ChemOffice.			16
3	Тема 3. Представлення хімічних реакцій. Типове представлення реакцій. Представлення реакції як набору реагентів та продуктів. Представлення реакцій як характеристики реакційного центру. Представлення реакцій як різниці продуктів та вихідних сполук. Представлення реакції Фуджіта. Представлення Уггі-Дугуджі. Лінійне представлення реакції у форматі SMIRKS. Опис реакцій з використання таблиць зв'язків вихідних на кінцевих молекул у форматі MDL – RXN та RDF.	4		
	Практичне заняття 3. Створення бази реакцій на основі паперових версій лабораторних журналів.		2	
	Самостійна робота 3. Підготовка сету реакцій у форматі для подання у Open Reaction Database.			16
4	Тема 4. Хімічні бази даних Хімічні бази даних Типи баз. Основи молекул, спектрів, білків, кристалографічні, біомолекули. Види пошуку у хімічних базах даних. Пошук по структурі, підструктурі, суперструктурі. Подібність хімічний структур. Коефіцієнт Танімото. Пошук за молекулярною подібністю в базах даних. Основні алгоритми пошуку. Використання скринів. Рекурсивний підхід Ульманівський підхід. Пошук у 3D базах даних. Фармакофори. Фармакофорний пошук.	4		
	Практичне заняття 4. Мова підструктурних запитів SMARTS. Пошук за структурами Маркуша. Формування складних підструктурних запитів для пошуку у базах Reaxys та SciFinder		2	
	Самостійна робота 4. Самостійна генерація бібліотеки запитів SMARTS. Самостійне створення структурної бази даних.			16
5	Тема 5. Дизайн бібліотек. Створення бібліотек для віртуального скринінгу та для високопродуктивного скринінгу. Теоретична комбінаторна хімія. Різноманітні (Diversity Set) та сфокусовані бібліотеки. Генерація структур. Кластеризація молекул. Ієрархічні підходи. Неієрархічні підходи. Відбір молекул без кластеризації.	4		
	Практичне заняття 5. Використання RECAP, BRICS, SynthI, Fragmenter. Кат-офф фільтри для генерування бібліотек під різноманітні потреби. Знайомство з програмними пакетами RDKit та KNIME.		2	
	Самостійна робота 5. Дизайн бібліотеки для фрагментного скринінгу на базі наявної бібліотеки будівельних блоків.			16
6	Тема 6. Молекулярні дескриптори. Дескриптори. Визначення та використання дескрипторів. Роль дескрипторів у хемоінформатиці. Різноманітність дескрипторів. Класифікація дескрипторів за функціональністю. Фізико-хімічні дескриптори. Топологічні індекси. Тривимірні. Фрагментні дескриптори.	4		

	Фармакофорні дескриптори. Константи замісників. Квантово-хімічні дескриптори. Дескриптори молекулярної схожості.			
	Практичне заняття 6. Розрахунок дескрипторів для молекул.		2	
	Самостійна робота 6. Опанування методів розрахунку найбільш широковживаних дескрипторів у потреб медичної хімії.			16
7	Тема 7. Хімічний простір. Концепція хімічного простору. Об'єкти хімічного простору. Хімічний простір дескрипторів. Навігація у хімічному просторі: координатні та не-координатні підходи. Візуалізація хімічного простору.	4		
	Самостійна робота. Опанування літератури (оригінальні роботи, огляди), щодо використання концепції хімічного простору у медичній хімії.			16
8	Тема 8. Аналіз даних та побудови моделей. Принципи побудови моделей у класичній статистиці. Функція правдоподібності та метод найменших квадратів (МНК). Поняття про оверфіттинг, про навчальні та контрольні вибірки, внутрішній і зовнішній, перехресний і ковзний контроль. Критерії оцінки якості класифікаційних моделей. Поняття про ROC-криві. Лінійна регресія. Множинна лінійна регресія (MLR). Основи методу. Проблема скоррелювання та значущості дескрипторів. Відбір дескрипторів. Покрокова MLR. Поняття про багатовимірний аналіз даних. Метод основних компонентів (PCA). Побудова PCA. Алгоритм Nipals. Метод найменших часткових квадратів (PLS). Модифікація алгоритму NIPALS для PLS. Геометричний зміст. Візуалізація результатів.	4		
	Практичне заняття 8. Практична робота з моделювання зв'язку структури та властивостей молекул з використанням методів лінійної регресії у програмах ISIDA-MLR та Weka. Підбір параметрів методів та валідація моделі. Вивчення вибірки даних із використанням методу.		2	
	Самостійна робота 8. Опанування математичного апарату аналізу даних.			16
9	Тема 9. Моделювання "структура-властивість". Історія моделювання "структура-властивість" SAR/QSAR/QSPR. Класичний QSAR (методи Ганча, Фрі-Вільсона, Фуджита-Бана). SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах. Сучасні підходи. Передобробка даних. Хімічна передобробка: відбір даних та стандартизація. Математичне передоброблення: стандартизація, шкалювання, нормалізація. Випадкова кореляція та боротьба з нею. Консенсусні підходи. Область застосування. 3D QSAR, заснований на просторовому вирівнюванні. Методи просторового вирівнювання. CoMFA, CoMSIA, Grid. Методи 3D QSAR, незалежні від вирівнювання. Grind. Загальна концепція nD QSAR.	4		
	Практичне заняття 9. Відбір дескрипторів, побудова моделей структура-властивість та порівняння якості моделей. Знайомство з програмним пакетом DataWarrior.		4	
	Самостійна робота 9. Побудова QSAR моделі на основі літературних експериментальних даних.			18

Загальний обсяг 180 год., в тому числі:

Лекції – 34 год.

Практичні – 16 год.

Самостійна робота - 130 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. Chemoinformatics: a textbook. Ed. J. Gasteiger, T. Engel. - Weinheim: Wiley-VCH, 2003 - 649 с. Handbook of Chemoinformatics: From Data to Knowledge. Ed. J. Gasteiger -Weinheim: Wiley-VCH, 2003 - 1870 с.
2. Todeschini, R. and Consonni, V. (2009) Molecular Descriptors for Chemoinformatics. Wiley-VCH, Weinheim, Vols. I and II. <https://doi.org/10.1002/9783527628766>
3. Kunal Roy, Supratik Kar, Rudra Narayan Das. Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment. 2015 Elsevier Inc. ISBN: 978-0-12-801505-6

Додаткова:

1. Weininger D. SMILES, a Chemical Language and Information System. 1. Introduction to Methodology and Encoding Rules. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1988, 28, 31-36.
2. Weininger D., Weininger A., Weininger J.L. SMILES. 2. Algorithm for Generation of Unique SMILES Notation // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1989, 29, 97-101.
3. Krotko, D.G. Atomic ring invariant and Modified CANON extended connectivity algorithm for symmetry perception in molecular graphs and rigorous canonicalization of SMILES. *J Cheminform* 12, 48 (2020).
4. Delannée, V., Nicklaus, M.C. ReactionCode: format for reaction searching, analysis, classification, transform, and encoding/decoding. *J Cheminform* 12, 72 (2020). <https://doi.org/10.1186/s13321-020-00476-x>
5. Steven M. Kearnes, Michael R. Maser, Michael Wleklinski, Anton Kast, Abigail G. Doyle, Spencer D. Dreher, Joel M. Hawkins, Klavs F. Jensen, and Connor W. Coley The Open Reaction Database. *Journal of the American Chemical Society* 2021 143 (45), 18820-18826. DOI: 10.1021/jacs.1c09820

10. Додаткові джерела та інформація:

<https://www.daylight.com/about/index.html>

<https://www.reaxys.com>

<https://scifinder.cas.org>

<https://www.ebi.ac.uk/chembl>

<http://zinc.docking.org>

<http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>

Контрольні запитання до курсу:

1. Що таке SMILES? Знайти відповідність SMILES до конкретної структури.
2. Що таке InChI? Знайти відповідність InChI до конкретної структури.
3. Матриці суміжності для представлення графів. З конкретної структури згенерувати відповідну матрицю суміжності.
4. Структури Маркуша.
5. Типові формати файлів (MDL, Sybyl, PDB, sdf, rtf) та конвертація між уявленнями.
6. 2D-3D конвертація.
7. Лінійне представлення реакції у форматі SMIRKS.
8. Опис реакцій з використанням таблиць зв'язків вихідних на кінцевих молекул у форматі MDL – RXN та RDF.
9. Представлення реакції Фуджіта.
10. Представлення Уггі-Дугуджі.

11. Open Reaction Database.
12. Типи хімічних баз даних.
13. Види пошуку у хімічних базах даних.
14. Пошук по структурі, підструктурі, суперструктурі. Алгоритми та проблематика.
15. Подібність хімічних структур. Коефіцієнт Танімото.
16. Пошук за молекулярною подібністю в базах даних. Практичне значення цього пошуку.
17. Пошук у 3D базах даних. Фармакофори. Фармакофорний пошук.
18. Мова підструктурних запитів SMARTS.
19. Формування складних підструктурних запитів для пошуку у базах Reaxys та SciFinder.
20. Теоретична комбінаторна хімія. *In silico* створення бібліотек для віртуального скринінгу.
21. Різноманітні (Diversity Set) та сфокусовані бібліотеки.
22. Використання RECAP, BRICS, SynthI та їх порівняння.
23. Програмні пакети RDKit та KNIME.
24. Визначення та використання дескрипторів. Різноманітність дескрипторів.
25. Класифікація дескрипторів за функціональністю.
26. Фізико-хімічні дескриптори.
27. Тривимірні, фрагментні та фармакофорні дескриптори.
28. Константи замісників.
29. Методи розрахунку дескрипторів для молекул.
30. Концепція хімічного простору.
31. Методи розширення хімічного простору.
32. Методи навігації у хімічному просторі.
33. Візуалізація хімічного простору.
34. Концепція віртуального скринінгу.
35. Принципи побудови моделей у класичній статистиці. Функція правдоподібності та метод найменших квадратів (МНК).
36. Критерії оцінки якості класифікаційних моделей. Поняття про ROC-криві.
37. Лінійна регресія. Множинна лінійна регресія (MLR).
38. Поняття про багатовимірний аналіз даних. Метод основних компонентів (PCA).
39. Програми ISIDA-MLR та Weka.
40. Класичний QSAR (методи Ганча, Фрі-Вільсона, Фуджита-Бана).
41. SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах.
42. Передобробка даних. Хімічна передобробка: відбір даних та стандартизація.
43. Математичне передоброблення: стандартизація, шкалювання, нормалізація.
44. 3D QSAR, заснований на просторовому вирівнюванні.
45. Загальна концепція nD QSAR.
46. Програмний пакет AutoDock
47. Програмний пакет MOE
48. Програмний пакет GROMACS
49. Програмний пакет 5. Gaussian
50. Програмний пакет 8. DataWarrior.