



**Міжнародний гуманітарний університет
Факультет стоматології та фармації
Кафедра загальної та клінічної фармакології**

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Комп'ютерне моделювання у фармації**

Галузь знань
Спеціальність
Назва освітньої програми
Рівень вищої освіти

22 «Охорона здоров'я»

226 «Фармація, промислова фармація»

Фармація

другий (магістерський) рівень

Розробники і викладачі	Контактний тел.	E-mail
Зубілевич Тамара Миколаївна	+38 (067)4825520	883920@meta.ua

1. АНОТАЦІЯ ДО КУРСУ

Предметом вивчення навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання в фармації» є інформаційні процеси, що передбачають використання персонального комп'ютера

Мета Метою викладання навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» полягає у наданні необхідних знань студентам фармацевтичного факультету в галузі інноваційних технологій у фармації, пов'язаних з комп'ютеризацією для використання їх у майбутній практичній діяльності провізора.

Навчальна дисципліна «Комп'ютерне моделювання в фармації» базується на вивченні студентами дисциплін та інтегрується з цими дисциплінами: медична та біологічна фізика, європейський стандарт комп'ютерної грамотності, фізична та колоїдна хімія, технологія лікарських форм, фармакогнозія, органічна хімія і біоорганічна хімія, фармацевтична хімія та інформаційні технології в фармації, а також закладає основи для вивчення дисциплін належна фармацевтична практика, організація та економіка фармації, менеджмент та маркетинг у фармації та ресурсознавство лікарських рослин

**2. ОЧІКУВАНІ КОМПЕТЕНТНОСТІ, ЯКІ ПЛАНУЄТЬСЯ СФОРМУВАТИ
ТА ДОСЯГНЕННЯ ПРОГРАМНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ**

У процесі реалізації програми дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» формуються наступні компетентності із передбачених освітньою програмою:

Інтегральна компетентність

Здатність розв'язувати типові та складні спеціалізовані задачі та критично осмислювати й вирішувати практичні проблеми у професійній фармацевтичній та/або дослідницько-інноваційній діяльності із застосуванням положень, теорій та методів фундаментальних, хімічних, технологічних, біомедичних та соціально-економічних наук; інтегрувати знання та вирішувати складні питання, формулювати судження за недостатньої або обмеженої інформації; зрозуміло і недвозначно доносити власні знання, висновки та їх обґрунтованість до фахової та нефахової аудиторії.

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК. 4. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу та оволодівати сучасними знаннями.

ЗК. 9. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК. 14. Здатність до проведення дослідницької та інноваційної діяльності, проведення досліджень на відповідному рівні.

Спеціальні (фахові) компетентності

ФК 10. Здатність організувати діяльність аптеки із забезпечення населення, закладів охорони здоров'я лікарськими засобами та іншими товарами аптечного асортименту й впровадити в них відповідні системи звітності й обліку (управлінського, статистичного, бухгалтерського та фінансового) відповідно до вимог Національної лікарської політики, Належної аптечної практики (GPP) та здійснювати товарознавчий аналіз, адміністративне діловодство з урахуванням організаційно-правових норм фармацевтичного законодавства.

ФК 11. Здатність аналізувати та прогнозувати основні економічні показники діяльності аптечних закладів, здійснювати розрахунки основних податків та зборів, формувати ціни на лікарські засоби та вироби медичного призначення відповідно до чинного законодавства України.

ФК 26. Здатність здійснювати діяльність з розробки і оформлення документації щодо чіткої визначеності технологічних процесів виготовлення та виробництва лікарських засобів відповідно до правил належних практик.

Навчальна дисципліна «Комп'ютерне моделювання у фармації» забезпечує досягнення програмних результатів навчання (РН), передбачених освітньою програмою:

РН 2. Застосовувати знання з загальних та фахових дисциплін у професійній діяльності.

РН 4. Використовувати результати самостійного пошуку, аналізу та синтезу інформації з різних джерел для рішення типових завдань професійної діяльності.

РН 9. Здійснювати професійну діяльність використовуючи інформаційні технології, «Інформаційні бази даних», системи навігації, Internet-ресурси, програмні засоби та інші інформаційно-комунікаційні технології.

РН 11. Використовувати методи оцінювання показників якості діяльності, виявляти резерви підвищення ефективності праці.

РН 15. Розробляти й оформлювати технологічну документацію щодо виробництва (виготовлення) лікарських препаратів в аптеках і на фармацевтичних підприємствах.

РН 20. Здійснювати всі види обліку в аптечних закладах, адміністративне діловодство. Здійснювати процеси товарознавчого аналізу, забезпечувати вхідний контроль якості лікарських засобів та документувати їх результати.

РН 22. Здатність розробляти, впроваджувати та застосовувати підходи менеджменту у професійній діяльності аптечних, оптово-посередницьких, виробничих підприємств та інших фармацевтичних організацій відповідно до принципів Належної практики фармацевтичної освіти та Глобальної рамки FIP.

РН 23. Здатність організувати і здійснювати загальне та маркетингове управління асортиментною, товарно - інноваційною, ціною,

збутовою та комунікативною політиками суб'єктів фармацевтичного ринку на основі результатів маркетингових досліджень та з урахуванням ринкових процесів на національному і міжнародному ринках.

3. ОБСЯГ ТА ОЗНАКИ КУРСУ

Загалом		Вид заняття (денне відділення / заочне відділення)			Ознаки курсу		
ЄКТС	годин	Лекційні заняття	Лабораторні/практичні заняття	Самостійна робота	Курс, (рік навчання)	Семестр	Обов'язкова / вибіркова
3	90	-	42/12	48/78	4	7	Обов'язкова

4. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин							
	денна форма				заочна форма			
	усього	у тому числі			усього	у тому числі		
		лекц.	прак	сам. роб.		лекц.	прак	сам. роб.
Тема 1. Опрацювання експериментальних даних в Mathcad..	11		5	6	11		2	9
Тема 2. Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad	11		5	6	11		2	9
Тема 3. Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	11		5	6	11		2	9
Тема 4. Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	8		2	6	11		2	9
Тема 5. Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	16		10	6	11		2	9
Тема 6. Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	11		5	6	11		2	9
Тема 7. Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	11		5	6	9			9
Тема 8. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS	11		5	6	15			15
Усього годин	90		42	48			12	78
ПІДСУМКОВИЙ КОНТРОЛЬ – ЕКЗАМЕН/ЗАЛІК								

5. ТЕХНІЧНЕ Й ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ / ОБЛАДНАННЯ

Студенти отримують теми та питання курсу, основну і додаткову літературу, рекомендації, завдання та оцінки за їх виконання як традиційним шляхом, так і з використанням університетської платформи он-лайн навчання на базі Moodle. Окрім того, практичні навички у пошуку та аналізу інформації за курсом, з оформлення індивідуальних завдань, тощо, студенти отримують, користуючись університетськими комп'ютерними класами та бібліотекою.

6. ПИТАННЯ ДО ЛАБОРАТОРНИХ/ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п. п.	Назва теми	Кількість годин
1	Опрацювання експериментальних даних в Mathcad..	5/2
2	Створення та аналіз лінійних рівноважних, стаціонарних та статичних моделей в Mathcad:	5/2
3	Використання QbD в хроматографії для фармацевтичних задач на основі платформи ACD/Labs.	5/2
4	Автоматичне розпізнання сполук в рідинній хроматографії, маспектроскопії, УФ-спектроскопії програмними засобами ACD/Labs.	2/2
5	Ідентифікація метаболітів з допомогою MetaSense.	10/2
6	Оптимізація для попередніх досліджень на основі ACD-Labs.	5/2
7	Скринінг ефективних хроматографічних методів з допомогою ACD / Labs Chromatographic Methods.	5
8	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS	5
Всього		42/12

7. САМОСТІЙНА РОБОТА

До самостійної роботи студентів щодо вивчення дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» включаються:

1. Знайомство з науковою та навчальною літературою відповідно зазначених у програмі тем.
2. Опрацювання лекційного матеріалу.
3. Підготовка до практичних занять.
4. Консультації з викладачем протягом семестру.
5. Самостійне опрацювання окремих питань навчальної дисципліни.
6. Підготовка та виконання індивідуальних завдань у вигляді есе, рефератів тощо.
7. Підготовка до підсумкового контролю.

Тематика та питання до самостійної підготовки та індивідуальних завдань

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
		денна форма
1	Застосування методів прийняття рішень для моделювання заходів маркетингової політики фармацевтичних закладів. Електронна комерція. Інформаційна підтримка за застосування глобальної мережі Інтернет.	6/9
2	Математичне моделювання фармацевтичних і медико біологічних задач. Основи роботи зі спеціальним програмним забезпеченням. Технологія структурного аналізу і моделювання SADT.	6/9
3	Організація інформаційного середовища на базі хмарних технологій MS Office 365	6/9
4	Програмне забезпечення статистичних методів контролю якості лікарських засобів і аналізу виробничих процесів з їх створення. Статистичні методи обробки інформації. Первинна статистична обробка кількісних ознак, оцінка значущості їх відмінності за допомогою програми Excel.	6/9
5	Моделі оптимізації процесів перевезень і розподілу ресурсів при організації виробничої діяльності фармацевтичних підприємств і аптечних закладів. Планування експерименту в програмі STATISTICA.	6/9
6	Моделювання як метод дослідження у фармації. Основні етапи розв'язування задач фармації засобами комп'ютерних технологій. Віртуалізація лабораторних досліджень у фармації. Експертні системи у фармації.	6/9
7	Основні функції системи комп'ютерної математики MathCAD. Обчислення в системі MathCAD	6/9
8	Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS	6/15
Всього		48/78

8. ВИДИ ТА МЕТОДИ КОНТРОЛЮ

Робоча програма навчальної дисципліни передбачає наступні види та методи контролю:

Види контролю	Складові оцінювання
поточний контроль , який здійснюється у ході: проведення практичних занять, виконання індивідуального завдання; проведення консультацій та відпрацювань.	50%

підсумковий контроль, який здійснюється у ході проведення іспиту (заліку).	50%
--	-----

Методи діагностики знань (контролю)	фронтальне опитування; наукова доповідь, реферати, усне повідомлення, індивідуальне опитування; робота у групах; ділова гра, розв'язання ситуаційних завдань, кейсів, практичних завдань, іспит (залік)
-------------------------------------	---

Питання до іспиту

1. Використання системи Matcad в якості інженерного калькулятора.
2. Символьна алгебра: спрощення виразів, розклад на множники, розклад виразів, приведення подібних доданків, обчислення кінечних або безкінечних сум та добутків;
3. Матрична алгебра.
4. Математичний аналіз: символічне диференціювання, інтегрування, розкладання в ряди, розв'язок рівнянь.
5. Інтегральні перетворення: Фур'є, Лапласа, Z-перетворення.
6. Чисельні методи в Matcad: Інтегрування і диференціювання.
7. Чисельні методи в Matcad: алгебраїчні рівняння і оптимізація. Матричні обчислення. Спеціальні функції.
8. Чисельні методи в Matcad: звичайні диференціальні рівняння.
9. Чисельні методи в Matcad: крайові задачі.
10. Чисельні методи в Matcad: диференціальні рівняння в частинних похідних.
11. Математична статистика: нормальний (Гаусовий) та інші статистичні розподіли випадкових величин. Статистичні характеристики: побудова гістограм, визначення середнього значення і дисперсії, коваріації та кореляції, коефіцієнтів асиметрії та ексцесу та ін. Приклади інтервальної оцінки дисперсії та перевірки статистичних гіпотез.
12. Опрацювання даних: інтерполяція, регресія, згладжування і фільтрація, інтегральні перетворення.
13. Метод найменших квадратів для згладжування кривих: лінійна, поліноміальна регресія, регресія загального та спеціального вигляду.
14. Створення графіків: двохмірних та трьохмірних, їх форматування, трасіровка, масштабування. Створення анімації. Ввід-вивід у зовнішні текстові, графічні або звукові файли.

15. Суть модельного вивчення об'єктів. Модель як форма наукового пізнання.
16. Основи комп'ютерного прогнозування біологічної активності органічних молекул в програмі PASS.
17. Сучасні напрямки пошуку нових лікарських препаратів. Основні етапи відбору і аналізу потенційних біологічно активних сполук. Методи комп'ютерного моделювання лікарських препаратів (Computer Aided Drug Design, CADD). Методи, що ґрунтуються на аналізі зв'язку "структура-активність" (Structure-Activity Relationships = SAR; Quantitative Structure-Activity Relationships = QSAR).

9. ОЦІНЮВАННЯ ПОТОЧНОЇ, САМОСТІЙНОЇ ТА ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ СТУДЕНТІВ З ПІДСУМКОВИМ КОНТРОЛЕМ У ФОРМІ ЕКЗАМЕНУ/ ЗАЛІКУ

Денна форма навчання			
<i>Поточний контроль</i>			
Види роботи	Планові терміни виконання	Форми контролю та звітності	Максимальний відсоток оцінювання
Систематичність і активність роботи на семінарських (практичних) заняттях			
1.1. Підготовка до практичних занять	Відповідно до робочої програми та розкладу занять	Перевірка обсягу та якості засвоєного матеріалу під час практичних занять	25
Виконання завдань для самостійного опрацювання			
1.2. Підготовка програмного матеріалу (тем, питань), що виносяться на самостійне вивчення	-//-	Розгляд відповідного матеріалу під час аудиторних занять або ІКР ¹ , перевірка конспектів навчальних текстів тощо	10
Виконання індивідуальних завдань (науково-дослідна робота студента)			
1.3. Підготовка реферату (есе) за заданою тематикою	Відповідно до розкладу занять і графіку ІКР	Обговорення (захист) матеріалів реферату (есе)	10
1.4. Інші види індивідуальних завдань, в т.ч. підготовка наукових публікацій, участь у роботі круглих столів, конференцій тощо.	-//-	Обговорення результатів проведеної роботи під час аудиторних занять або ІКР, наукових конференцій та круглих столів.	5
Разом балів за поточний контроль			50
Підсумковий контроль екзамен / залік			50

¹ Індивідуально-консультативна робота викладача зі студентами

Всього балів			100
Заочна форма навчання			
Поточний контроль			
Види самостійної роботи	Планові терміни виконання	Форми контролю та звітності	Максимальний відсоток оцінювання
Систематичність і активність роботи під час аудиторних занять			
1.1. Підготовка до аудиторних занять	Відповідно до розкладу	Перевірка обсягу та якості засвоєного матеріалу під час аудиторних занять	15
За виконання контрольних робіт (завдань)			
1.2. Підготовка контрольних робіт	-//-	Перевірка контрольних робіт (завдань)	15
Виконання завдань для самостійного опрацювання			
1.3. Підготовка програмного матеріалу (тем, питань), що виноситься на самостійне вивчення	-//-	Розгляд відповідного матеріалу під час аудиторних занять або ІКР ² , перевірка конспектів навчальних текстів тощо	10
Виконання індивідуальних завдань (науково-дослідна робота студента)			
2.1. Підготовка реферату (есе) за заданою тематикою	Відповідно до графіку ІКР	Обговорення (захист) матеріалів реферату (есе) під час ІКР	5
2.3. Інші види індивідуальних завдань, в т.ч. підготовка наукових публікацій, участь у роботі круглих столів, конференцій тощо.	-//-	Обговорення результатів проведеної роботи під час ІКР, наукових конференцій та круглих столів.	5
Разом балів за поточний контроль			50
Підсумковий контроль екзамен / залік			50
Всього балів підсумкової оцінки			100

10. КРИТЕРІЇ ПІДСУМКОВОЇ ОЦІНКИ ЗНАНЬ СТУДЕНТІВ (для іспиту / заліку)

Рівень знань оцінюється:

- «відмінно» / «зараховано» А - від 90 до 100 балів. Студент виявляє особливі творчі здібності, вміє самостійно знаходити та опрацьовувати необхідну інформацію, демонструє знання матеріалу, проводить узагальнення і висновки. Був присутній на лекціях та

² Індивідуально-консультативна робота викладача зі студентами

семінарських заняттях, під час яких давав вичерпні, обґрунтовані, теоретично і практично правильні відповіді, має конспект з виконаними завданнями до самостійної роботи, презентував реферат (есе) за заданою тематикою, проявляє активність і творчість у науково-дослідній роботі;

- «добре» / «зараховано» В - від 82 до 89 балів. Студент володіє знаннями матеріалу, але допускає незначні помилки у формуванні термінів, категорій, проте за допомогою викладача швидко орієнтується і знаходить правильні відповіді. Був присутній на лекціях та семінарських заняттях, має конспект з виконаними завданнями до самостійної роботи, презентував реферат (есе) за заданою тематикою, проявляє активність і творчість у науково-дослідній роботі;

- «добре» / «зараховано» С - від 74 до 81 балів. Студент відтворює значну частину теоретичного матеріалу, виявляє знання і розуміння основних положень, з допомогою викладача може аналізувати навчальний матеріал, але дає недостатньо обґрунтовані, невичерпні відповіді, допускає помилки. При цьому враховується наявність конспекту з виконаними завданнями до самостійної роботи, реферату та активність у науково-дослідній роботі;

- «задовільно» / «зараховано» D - від 64 до 73 балів. Студент був присутній не на всіх лекціях та семінарських заняттях, володіє навчальним матеріалом на середньому рівні, допускає помилки, серед яких є значна кількість суттєвих. При цьому враховується наявність конспекту з виконаними завданнями до самостійної роботи, рефератів (есе);

- «задовільно» / «зараховано» E - від 60 до 63 балів. Студент був присутній не на всіх лекціях та семінарських заняттях, володіє навчальним матеріалом на рівні, вищому за початковий, значну частину його відтворює на репродуктивному рівні, на всі запитання дає необґрунтовані, невичерпні відповіді, допускає помилки, має неповний конспект з завданнями до самостійної роботи.

- «незадовільно з можливістю повторного складання» / «не зараховано» Fx – від 35 до 59 балів. Студент володіє матеріалом на рівні окремих фрагментів, що становлять незначну частину навчального матеріалу.

- «незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни» / «не зараховано» F – від 0 до 34 балів. Студент не володіє навчальним матеріалом.

Таблиця відповідності результатів контролю знань за різними шкалами

100-бальною шкалою	Шкала за ECTS	За національною шкалою	
		екзамен	залік
90-100 (10-12)	A	Відмінно	зараховано
82-89 (8-9)	B	Добре	
74-81(6-7)	C	Задовільно	
64-73 (5)	D		
60-63 (4)	E	незадовільно	не зараховано
35-59 (3)	Fx		
1-34 (2)	F		

11. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Базова

1. Комп'ютерне моделювання у фармації: Навч. посіб. для мед. ВНЗ IV р.а. — 2-е вид., випр. Рекомендовано МОЗ / Булах І.С. та ін. — К., 2017. — 208 с., тв. пал.

2. Комп'ютерне моделювання в біології / Упорядники О.В. Оглобля, М.С. Мірошніченко, С.О. Костерін. – К.: Видавничий центр «Азбука», 2012. – 120 с.

Допоміжна

1. Новиков Ф.А., Яценко А.Д. Microsoft Office XP в целом. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 928 с.
2. ОУГЛТРИ ТЕРРИ. Microsoft Office XP в целом. — СПб.: ООО «ДиаСофтЮП», 2002. — 848 с