

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ  
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ  
Директор института химии  
д.х.н., проф. Горячева И.Ю.

"16" 06 2023 г.

Рабочая программа дисциплины  
Хемоинформатика

Направление подготовки бакалавриата  
04.03.01- Химия

Профиль подготовки бакалавриата  
Аналитическая химия и химическая экспертиза

Квалификация (степень) выпускника

**Бакалавр**

Форма обучения  
очная

Саратов,  
2023

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Бурмистрова Наталия Анатольевна		16.06.23
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		16.06.23
Заведующий кафедрой	Горячева Ирина Юрьевна		16.06.23
Специалист Учебно-го управления			

## 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Хемоинформатика» является изучение современных возможностей информационных технологий и программного обеспечения, необходимого при решении задач в области химии, как средств управления и сбора данных, первичной обработки данных, интерпретации полученных результатов.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Хемоинформатика» (Б1.В.02) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули») рабочего учебного плана ООП по направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиля «Аналитическая химия и химическая экспертиза». Данная дисциплина изучается в 6 семестре.

Для освоения программы по дисциплине «Хемоинформатика» студент должен знать основы математической статистики и матричной алгебры, полученные в предшествующих дисциплинах бакалавриата «Математика», «Методы математической статистики в химии». Студент должен владеть основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, в программах Microsoft Word и Microsoft Excel, полученными в рамках курса «Информатика».

Освоение дисциплины «Хемоинформатика» необходимо при выполнении и защите выпускной квалификационной работ по направлению 04.03.01 Химия, при решении научно-исследовательских задач в будущей профессиональной деятельности.

## 3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
УК-2. Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	<b>3.1_ Б.УК-2.</b> Решает конкретные задачи проекта заявленного качества и за установленное время <b>4.1_ Б.УК-2.</b> Публично представляет результаты решения конкретной задачи проекта.	<b>Знать:</b> - основные этапы, закономерности развития, современные возможности использования информационных технологий при решении химических задач. <b>Уметь:</b> - грамотно представлять результаты химического эксперимента в виде таблиц, графиков и рисунков с применением электронных таблиц Microsoft Excel и публично представлять результаты профессиональной деятельности в письменном и

		<p>мультимедийном формате.</p> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- методами и основными программными средствами для представления результатов химического эксперимента.</li> </ul>
<p><b>ПК-3.</b> Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы</p>	<p><b>ПК-3.1.</b> Проводит первичный поиск информации по заданной тематике, в том числе, с использованием баз данных</p> <p><b>ПК-3.2.</b> Систематизирует научно-техническую информацию на русском и иностранном языках по заданной тематике</p> <p><b>ПК-3.3.</b> Анализирует научно-техническую информацию для решения конкретной задачи</p>	<p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- место и роль компьютерных технологий в химии, как средств управления и сбора данных, первичной обработки данных, интерпретации полученных результатов;</li> <li>- основы многомерного подхода к обработке данных.</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать компьютерные технологии для поиска и обработки научной и научно-технической информации, обработки данных и интерпретации полученных результатов;</li> <li>- в ходе самостоятельной работы анализировать научную литературу с целью получения новых знаний.</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- навыками использования математических методов и умением использовать эти методы в планировании и осуществлении химических экспериментов;</li> <li>- многомерными методами математического моделирования процесса и объекта анализа с применением доступных программных средств.</li> </ul>

#### 4. Структура и содержание дисциплины «Хемоинформатика».

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (144 часа)

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)							Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Лаборат. раб		СР	Контроль	Иная контактная работа	Всего	
					Общая трудоемкость	Из них – практическая подготовка					
1	Введение. Компьютерные технологии при решении химических задач.	6	1	2	4	1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			2	2		1					
2	Введение в хемоинформатику: объекты исследования, задачи и методы	6	3	2	4	1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			4	2		1					2
3	Поиск химической информации. Базы данных и электронные библиотеки.	6	5	2	4	1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			6	2		1					
4	Представление химических со-	6	7	2	8	1	2				Защита рефератов

	единений и химических реакций. Структурные базы данных.		8	2		1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			9	2		1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			10	2		1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
5.	Компьютеризация анализа	6	11	2	6	1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			12	2		1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			13	2		1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
6	Хеометрика	6	14	2	8	1	2				Отчет в лабораторном журнале (электронный документ).
			15	2		1	2				Защита лабораторной работы
			16	2		1	2				Защита рефератов
			17	2		1	2				Защита рефератов
7	Информационные ресурсы	6	18	2	2	1	2				Защита рефератов
	<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>6</b>						<b>36</b>			<b>Экзамен</b>
	<b>Итого:</b>			<b>36</b>	<b>36</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>36</b>		<b>144</b>	

## Содержание дисциплины

**1. Введение. Компьютерные технологии при решении химических задач.** Основные этапы и закономерности развития применения математики и информационных технологий к химическим задачам. Компьютерная (математическая) и вычислительная химии, хемоинформатика, хеометрика. Математические модели в современной химии. Стандартные компьютерные программы и их возможности в различных областях химических исследований (исследование структуры вещества, термодинамических характеристик веществ и процессов, фазовых превращений).

**2. Введение в хемоинформатику: объекты исследования, задачи и методы.** История развития хемоинформатики. Сферы применения и связь с другими науками. Задачи и методы хемоинформатики.

**3. Поиск химической информации. Базы данных и электронные библиотеки.** Библиотеки и базы данных в поиске химической информации. Базы данных, доступные в СГУ. Создание и управление базами данных по химии.

**4. Представление химических соединений и химических реакций. Структурные базы данных.** Одномерное и многомерное представление химических соединений: химическая номенклатура, линейные нотации, теория графов (графическое и матричное представление), матрицы связей. Стандартные файлы структуры соединений. Моделирование свойств химических соединений и материалов.

**5. Компьютеризация анализа.** Компьютерные технологии в аналитической лаборатории: автоматизация работы, основные задачи (регистрация пробы, ввод результатов анализов, выполнение расчетов, утверждение и хранение результатов, формирование отчетной документации). Управление и сбора данных, первичная обработка данных, интерпретации полученных результатов. Современные методы математического моделирования процесса и объекта анализа, возможности применения стандартных компьютерных программ. Применение методов математической статистики в аналитической химии. Математическое планирование и моделирование химического эксперимента, решение задач оптимизации. Методы машинного обучения.

**6. Хеометрика.** Структура данных. Многомерная обработка результатов анализа. Классы решаемых задач (классификация и дискриминация, регрессионный анализ). Цели и методы факторного анализа. Корреляционный анализ. Метод максимального правдоподобия.

Метод главных компонент. Подготовка данных. Интерпретация результатов анализа. Практическое применение метода главных компонент к задачам классификации и дискриминации. SIMCA.

Многомерные методы регрессионного анализа. Практическое применение методов множественной регрессии, регрессии на главные компоненты и проекции на

латентные структуры. Проекция на латентные структуры и дискриминационный анализ.

**7. Информационные ресурсы.** Компьютерные технологии и программное обеспечение.

### **5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины.**

При освоении дисциплины «Хемоинформатика» предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. Образовательный процесс ориентирован как на теоретическую подготовку студентов, так и на приобретение ими практических навыков.

При освоении дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- интерактивные лекции с элементами междисциплинарного обучения,
- практические занятия с использованием инновационных методов обучения-неимитационные методы: групповые дискуссии, поисковые лабораторные работы, учебная научно-исследовательская работа; имитационные методы: проведение опережающей самостоятельной работы.

При проведении лабораторных занятий запланирована активная работа в компьютерном классе, в обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет.

При обучении студентов с *ограниченными возможностями здоровья и инвалидностью* необходимо:

- обеспечение студентов электронными образовательными ресурсами;
- проведение текущей и итоговой аттестации с учетом состояния здоровья обучающегося, при необходимости – предоставление дополнительного времени для подготовки ответа;
- оказание помощи студенту в организации самостоятельной работы;
- проведение индивидуальных консультаций;
- при необходимости содействие обучению по индивидуальному учебному плану.

### **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Самостоятельная работа студентов включает:

1. Поиск информации в сети Интернет, составление конспектов по заданной теме (документы Microsoft Word, PowerPoint).
2. Изучение дополнительной литературы.

3. Подготовку к лабораторным работам, их оформление, выполнение домашних заданий, подготовку к контрольной работе, текущему и итоговому контролю.
4. Подготовку рефератов.

### ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. Поиск и характеристика химических и образовательных Интернет-ресурсов по заданной тематике.
2. Создание текстового документа определенной структуры и форматирования с использованием графических иллюстраций. Компьютерный перевод.
3. Создание анимированной компьютерной презентации для сопровождения лекции по заданной теме.

Система текущего контроля самостоятельной работы студентов включает:

- оформление лабораторных работ;
- устный групповой и индивидуальный отчеты;
- защиту рефератов.

#### **Темы рефератов:**

1. Методы многомерного анализа в фармакофорном поиске.
2. Системы искусственного интеллекта
3. Многофакторный анализ в экологической химии
4. Комбинаторная химия.
5. Молекулярные дескрипторы и модели структуры-свойства.
6. Методы хемоинформатики в материаловедении.
7. Метод опорных векторов.
8. Метод k-средних.
9. Метод k-ближайших соседей.
10. Метод деревьев классификации.

Самостоятельная работа студентов подкреплена учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, руководства и инструкции по работе с программным обеспечением.

Система текущего контроля самостоятельной работы студентов включает:

- отчет о выполнении лабораторных работ;
- устный групповой и индивидуальный отчеты;
- групповые обсуждения по отдельным разделам дисциплины;
- защиту рефератов.

### Перечень вопросов для экзамена

1. Основные этапы и закономерности развития применения математики и информационных технологий к химическим задачам.
2. Компьютерная (математическая) и вычислительная химии, хемоинформатика, хеометрика.
3. Хемоинформатика: объекты исследования
4. Хемоинформатика: задачи и методы исследования
5. Одномерное кодирование структуры соединений.
6. Многомерное кодирование структуры соединений.
7. Базы данных и библиотеки. Поиск химической информации.
8. Структурные базы данных.
9. Математические модели в современной химии.
10. Математическое планирование и моделирование химического эксперимента, решение задач оптимизации в химических исследованиях.
11. Компьютерные технологии в аналитической лаборатории: автоматизация работы, основные задачи (регистрация пробы, ввод результатов анализов, выполнение расчетов, утверждение и хранение результатов, формирование отчетной документации).
12. Управление и сбор данных, первичная обработка данных, интерпретации полученных результатов.
13. Современные методы математического моделирования процесса и объекта анализа, возможности применения стандартных компьютерных программ.
14. Структура данных. Многомерная обработка результатов анализа. Классы решаемых задач (классификация и дискриминация, регрессионный анализ).
15. Корреляционный анализ.
16. Метод максимального правдоподобия.
17. Метод главных компонент. Подготовка данных. Интерпретация результатов анализа.
18. Многомерные методы регрессионного анализа.
19. Проекция на латентные структуры и дискриминационный анализ.

### 7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
6	15	20	0	15	0	10	40	<b>100</b>

## **Программа оценивания учебной деятельности студента**

### **6 семестр**

#### **Лекции – 0-15 баллов**

- оценивается посещаемость и работа на лекции, 0,85 балла за лекцию.

#### **Лабораторные занятия – 0-20 баллов**

*0-4 баллов* – лабораторная работа сдана значительно позже даты выполнения, значительные ошибки в оформлении и выполнении, которые не были исправлены в короткий срок.

*5-9 баллов* – лабораторная работа сдана позже даты выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены.

*10-14 баллов* – лабораторная работа сдана в день ее выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены;

*15-20 баллов* – лабораторная работа сдана в день ее выполнения, оформлена грамотно и самостоятельно, без ошибок.

#### **Практические занятия**

Не предусмотрены

#### **Самостоятельная работа – 0-15 баллов**

*0-4 баллов* – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены со значительными ошибками, не полностью. Работа сдана не в срок.

*5-9 баллов* – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены с незначительными ошибками, полностью. Работа сдана в срок.

*10-15 баллов* – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены практически без ошибок, полностью. Работа сдана в срок.

#### **Автоматизированное тестирование**

Не предусмотрено

#### **Другие виды учебной деятельности (рефераты) – 0-10 баллов**

- оценивается подготовка и представление рефератов

*0-3 баллов* – тема не раскрыта, плохо представлен;

*4-9 баллов* – тема раскрыта с незначительными ошибками, представление требует доработки;

*10-15 баллов* – тема раскрыта полностью, хорошо представлен.

#### **Промежуточная аттестация (экзамен) – 0-40 баллов**

Промежуточная аттестация (экзамен) проходит по всем темам и разделам дисциплины.

ответ на «отлично» оценивается от 35 до 40 баллов;

ответ на «хорошо» оценивается от 30 до 34 баллов;  
ответ на «удовлетворительно» оценивается от 23 до 29 баллов;  
ответ на «неудовлетворительно» оценивается от 0 до 22 баллов.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 6 семестр по дисциплине «Хемоинформатика» составляет 100 баллов.

Таблица 2.2. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Хемоинформатика» в оценку (экзамен):

85-100 баллов	«отлично»
73-84 баллов	«хорошо»
56-72 баллов	«удовлетворительно»
0-55 баллов	«не удовлетворительно»

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Хемоинформатика»

а) литература:

1. Черников Б.В. Информационные технологии в вопросах и ответах. М.: Финансы и статистика, 2005. – 317 с.
2. Федотова Е.Л., Портнов Е.М. Прикладные информационные технологии: Учебное пособие - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с. (ЭБС "Znanium.com")

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. MicrosoftWindowsPro 7 (Номер лицензии: OpenLicense № 46312747 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (70 шт.); MicrosoftWindowsVistaBusinessНомер лицензии: № 42226296, от 21.12.2009. (21 шт.);
2. MicrosoftOfficeStandard 2003 SP3 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (2 шт.);
3. MicrosoftOfficeProfessional 2003 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07); Office 2007 Suites (№ ИОП 47/08 от 07.07.2008) (10 шт.).
4. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса- Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal License № лицензии 0B00160530091836187178.

Сайты <https://depth-first.com/articles/2011/10/12/sixty-four-free-chemistry-databases/>,  
<http://www.chemspider.com/>

## **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Хемоинформатика»**

- Лекционные аудитории;
- Компьютерный класс, оснащенный программным обеспечением: интернет – браузер, Microsoft Office и с выходом в Интернет.
- Проектор мультимедия.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 04.03.01 Химия и профилю «Аналитическая химия и химическая экспертиза».

Автор:

проф., д.х.н.

Бурмистрова Н.А.

Программа одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от 16 июня 2023 года, протокол №10.