

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Хемоинформатика

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая физика и моделирование физических процессов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): Хуснутдинов Р.М.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-2	Способен свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач, и применять результаты научных исследований в проектной деятельности

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные понятия, определения, методы и подходы, используемые в хемоинформатике;
- методы хемоинформатики, требующиеся для решения тех или иных задач в химии;
- способы представления химических данных, методы осуществления поиска в химических базах данных; основные химические базы данных, используемые в различных научных целях, и методы работы с ними;
- основные дескрипторы, используемые в хемоинформатике;
- методы теоретического создания и отбора химических соединений для проведения биологического скрининга;
- базовый алгоритм виртуального скрининга химических соединений, основные фильтры, используемые в создании лекарственных препаратов;
- способы построения SAR/QSAR зависимости.

Должен уметь:

- создавать собственные базы данных, оперировать ими, проводить поиск в них;
- использовать дескрипторное представление химического пространства для поиска веществ с требуемыми свойствами, уметь вычислять основные дескрипторы и понимать их смысл;
- подготавливать и курировать данные;
- строить простейшие зависимости SAR/QSAR/QSPR, определять их статистическую значимость;
- использовать методы SAR/QSAR/QSPR в создании веществ с заданными свойствами.

Должен владеть:

- навыками по анализу химических баз данных для решения конкретных задач;
- навыками по решению химических задач с использованием средств хемоинформатики;
- основными программами для создания и оперирования базами данных;
- основными методами интеллектуального анализа и уметь строить SAR/QSAR/QSPR зависимости с их использованием.

Должен демонстрировать способность и готовность:

использовать средства хемоинформатики для предсказания структуры соединения с требуемыми биологическими, химическими и физико-химическими свойствами.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.01.01 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.02 "Физика (Теоретическая физика и моделирование физических процессов)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 25 часа(ов), в том числе лекции - 12 часа(ов), практические занятия - 12 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 29 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 18 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 1 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Тема 1. Введение в хемоинформатику.	1	2	0	2	0	0	0	4
2.	Тема 2. Тема 2. Химические соединения как объекты в пространстве данных.	1	2	0	2	0	0	0	4
3.	Тема 3. Тема 3. Молекулярный граф. Базовые определения теории графов.	1	2	0	2	0	0	0	4
4.	Тема 4. Тема 4. Внешнее представление химической информации.	1	2	0	2	0	0	0	6
5.	Тема 5. Тема 5. Молекулярные редакторы.	1	2	0	2	0	0	0	6
6.	Тема 6. Тема 6. Иерархия представления химических соединений.	1	2	0	2	0	0	0	5
	Итого		12	0	12	0	0	0	29

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Тема 1. Введение в хемоинформатику.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятия и определения хемоинформатики. Предмет хемоинформатики. Предпосылки возникновения хемоинформатики. Хемоинформатика и другие науки. Фундаментальные вопросы хемоинформатики. Возможности хемоинформатики. Области применения методов хемоинформатики.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Понятия и определения хемоинформатики. Предмет хемоинформатики. Предпосылки возникновения хемоинформатики. Хемоинформатика и другие науки. Фундаментальные вопросы хемоинформатики. Возможности хемоинформатики. Области применения методов хемоинформатики.

Тема 2. Тема 2. Химические соединения как объекты в пространстве данных.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

"Внутренний" и "внешний" типы представления химической информации. Молекулярные "отпечатки" (molecular fingerprints).

практическое занятие (2 часа(ов)):

"Внутренний" и "внешний" типы представления химической информации. Молекулярные "отпечатки" (molecular fingerprints). Определите молекулярные "отпечатки" для представленного набора молекул.

Тема 3. Тема 3. Молекулярный граф. Базовые определения теории графов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Молекулярные графы: понятия и определения. Базовые определения теории графов (вершина, степень вершины, путь, цикл, дерево, подграф и т.д.). Матричная форма представления молекулярного графа (матрица смежности, матрица расстояний, геометрические и топологические расстояния).

практическое занятие (2 часа(ов)):

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Разбор и усвоение лекционного материала. После каждой лекции студенту следует внимательно прочитать и разобрать конспект, при этом:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Понять и запомнить все новые определения. - Понять все математические выкладки и лежащие в их основе физические положения и допущения; воспроизвести все выкладки самостоятельно, не глядя в конспект. - Выполнить или доделать выкладки, которые лектор предписал сделать самостоятельно (если таковые имеются). - Если лектор предписал разобрать часть материала более подробно самостоятельно по доступным письменным или электронным источникам, то необходимо своевременно это сделать. - При возникновении каких-либо трудностей с пониманием материала рекомендуется обратиться за помощью к лектору. Для этого можно лично подойти к преподавателю, либо написать ему электронное письмо, сформулировав в нём возникающие вопросы. К письму можно прикрепить какие-либо электронные материалы, связанные с возникшими вопросами, например, отсканированные или сфотографированные листочки с рукописными комментариями, пометками, выкладками и т.п. <p>Самостоятельное изучение части материала. Если часть учебного материала отведена на самостоятельное изучение, то необходимо приступить к этому незамедлительно после указания преподавателя и освоить материал в отведенные им сроки. Материал следует изучить по доступным письменным и электронным источникам, о которых сообщит преподаватель.</p>
практические занятия	<p>Подготовка к практическим работам. Студент обязан перед выполнением каждой практической работы самостоятельно ознакомиться с теоретическим материалом и по ее результатам предоставить отчет. Перед выполнением практической работы требуется получить вариант задания. Далее необходимо ознакомиться с заданием. Выполнение практической работы следует начать с изучения теоретических сведений. Результаты работы необходимо оформить в виде отчета.</p> <p>Практическая работа считается выполненной, если предоставлен отчет о результатах выполнения задания и проведена защита проделанной работы.</p> <p>Защита проводится в два этапа:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Демонстрируются результаты выполнения задания. В случае практической работы, предусматривающей разработку программного приложения при помощи тестового примера доказываются, что результат, получаемый при выполнении программы правильный. 2) Необходимо ответить на ряд вопросов преподавателя, которые должны прояснить степень самостоятельности и понимания выполнения данной работы. <p>Вариант задания выдается преподавателем, проводящим практические занятия, он же принимает практическую работу. Каждая практическая работа оценивается определенным количеством баллов в соответствии с регламентом балльно-рейтинговой системы</p> <p>Каждый отчет должен содержать: 1. Заголовок практической работы (название и цель работы). 2. Задание к практической работе. 3. Краткие теоретические сведения. 4. Описание последовательности действий, произведенных при выполнении работы (ход работы). 5. Результаты выполнения практической работы (в электронном варианте или распечатанные).</p> <p>Крайне желательно, сделать все задачи. В обратном случае, трудно будет рассчитывать на высокую оценку. Компьютерные задания засчитываются по полной, если они сделаны самостоятельно и отрабатывают без замечаний на компьютерах преподавателя.</p>
самостоятельная работа	<p>Самостоятельное изучение части материала. Если часть учебного материала отведена на самостоятельное изучение, то необходимо приступить к этому незамедлительно после указания преподавателя и освоить материал в отведенные им сроки. Материал следует изучить по доступным письменным и электронным источникам, о которых сообщит преподаватель, и информация о которых содержится в учебном плане.</p> <p>Бонусы даются за выход к доске с лекционной темой, за активность, за нахождение опечаток в методичке, за хорошие GUI к задачам лектора, особенно к задаче по клеточным автоматам</p>
экзамен	<p>Обучающийся по материалам лекций, основной и дополнительной литературы должен всесторонне и систематически изучить вопросы, выносимые на экзамен. Он также обязан изучить учебно-программный материал и уметь свободно выполнять задания, предусмотренные программой, усвоить взаимосвязь основных понятий дисциплины в их значении для приобретаемой профессии, проявить творческие способности в понимании, изложении и использовании учебно-программного материала.</p>

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе "Теоретическая физика и моделирование физических процессов".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая физика и моделирование физических процессов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Основная литература:

1. Якубик, Д. Г. Химическая информатика : учебное пособие / Д. Г. Якубик. - Кемерово : КемГУ, 2021. - 79 с. - ISBN 978-5-8353-2734-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/173539> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Коломейченко, А. С. Информационные технологии / А. С. Коломейченко, Н. В. Польшакова, О. В. Чеха. 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. 212 с. - ISBN 978-5-507-45293-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/264086> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Уколов, А. И. Информационные технологии : учебное пособие / А. И. Уколов. - Керчь : КГМТУ, 2020. - 76 с. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/157005> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Жук, Ю. А. Информационные технологии: мультимедиа : учебное пособие для вузов / Ю. А. Жук. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 208 с. - ISBN 978-5-8114-6683-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/151663> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
5. Дмитриева, Т. М. Решение экономических задач средствами Microsoft Excel : учебно-методическое пособие / Т. М. Дмитриева. - Москва : РУТ (МИИТ), 2019. - 63 с. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/175583> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Давыдова, Н. А. Программирование : учебное пособие / Н. А. Давыдова, Е. В. Боровская. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 241 с. - ISBN 978-5-00101-788-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/151580> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Новицкая, И. А. Математическое программирование. Линейное программирование : учебное пособие / И. А. Новицкая, Т. С. Зайцева, А. Е. Мاستилин. - Новосибирск : СГУПС, 2020. - 170 с. - ISBN 978-5-00148-111-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/164616> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Кривцов, А. Н. Алгоритмизация и программирование. Основы программирования на C/C++ : учебное пособие / А. Н. Кривцов, С. В. Хорошенко. - Санкт-Петербург : СПбГУТ им. М.А. Бонч-Бруевича, 2020. - 202 с. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180057> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Городня, Л. В. Парадигма программирования : учебное пособие для вузов / Л. В. Городня. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 232 с. - ISBN 978-5-8114-6680-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180057> (дата обращения: 12.12.2023). - Режим доступа: для авториз. пользователей

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Теоретическая физика и моделирование физических процессов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента", доступ к которой предоставлен обучающимся. Многопрофильный образовательный ресурс "Консультант студента" является электронной библиотечной системой (ЭБС), предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Полностью соответствует требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования к комплектованию библиотек, в том числе электронных, в части формирования фондов основной и дополнительной литературы.