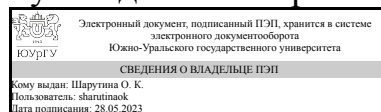


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель направления



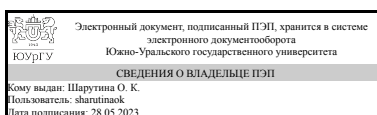
О. К. Шарутина

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.06 Хемоинформатика  
для направления 04.04.01 Химия  
уровень Магистратура  
форма обучения очная  
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

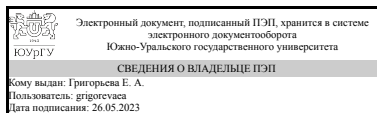
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,  
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,  
к.хим.н., доц., доцент



Е. А. Григорьева

## 1. Цели и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины является теоретическая и практическая подготовка студентов решать важнейшие задачи дизайна новых веществ и материалов с требуемыми свойствами. С учетом современного цифрового уровня развития химической науки, владение навыками моделирования «структура – свойство вещества» обеспечит научный базис для подготовки магистров в сфере фундаментальной химии, материаловедения, цифровых химических технологий. Задача дисциплины «Хемоинформатика» состоит в освоении студентами приемов и методов моделирования строения и структуры кристаллов, жидкостей, газов и прогнозирования свойств вещества, что необходимо при создании новых кристаллических материалов, полимеров, катализаторов, фотокатализаторов, реагентов для нефтехимии, и т.д. В результате изучения дисциплины студенты должны овладеть современными методами создания статистических моделей строения химических соединений, которые на основании структуры могут прогнозировать свойства состоящих из них материалов. В процессе изучения дисциплины «Хемоинформатика» закладывается общенаучный и профессиональный фундамент, формируются основные приемы цифровых химических технологий и познавательной деятельности, без которых не может обойтись современный специалист, работая в различных областях химической, биохимической науки или материаловедения.

## Краткое содержание дисциплины

История развития подходов к анализу взаимосвязей «структура – свойство». Разные уровни атомно-молекулярных дескрипторов в химии. Построение и валидация моделей атомно-молекулярных систем. Нахождение количественных взаимосвязей «структура – свойство». Требования к построению математических моделей, лежащих в основе прогноза свойств вещества. Методы машинного обучения в структурной химии. ND-QSAR.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

| Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)                                                                                                | Планируемые результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности | Знает: основные понятия и определения хемоинформатики (типы молекулярных дескрипторов, QSPR - взаимосвязь "структура - свойство", построение и валидация моделей "структура - свойство")<br>Умеет: строить QSPR модели, определять их достоверность, адекватность, статистическую значимость<br>Имеет практический опыт: кодировки состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES, поиска связи между структурой химических объектов и их свойствами |

## 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

|                                                               |                                             |
|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|
| Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана | Перечень последующих дисциплин, видов работ |
| Нет                                                           | Не предусмотрены                            |

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

#### 4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч., 70,5 ч. контактной работы

| Вид учебной работы                                                         | Всего часов | Распределение по семестрам в часах |
|----------------------------------------------------------------------------|-------------|------------------------------------|
|                                                                            |             | Номер семестра                     |
|                                                                            |             | 2                                  |
| Общая трудоёмкость дисциплины                                              | 108         | 108                                |
| <i>Аудиторные занятия:</i>                                                 | 64          | 64                                 |
| Лекции (Л)                                                                 | 32          | 32                                 |
| Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ) | 0           | 0                                  |
| Лабораторные работы (ЛР)                                                   | 32          | 32                                 |
| <i>Самостоятельная работа (СРС)</i>                                        | 37,5        | 37,5                               |
| Подготовка к дифференцированному зачету                                    | 7,5         | 7,5                                |
| Оформление отчетов по лабораторным работам                                 | 30          | 30                                 |
| Консультации и промежуточная аттестация                                    | 6,5         | 6,5                                |
| Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)                                   | -           | диф.зачет                          |

#### 5. Содержание дисциплины

| № раздела | Наименование разделов дисциплины                                                          | Объем аудиторных занятий по видам в часах |    |    |    |
|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|----|----|----|
|           |                                                                                           | Всего                                     | Л  | ПЗ | ЛР |
| 1         | Введение в хемоинформатику                                                                | 2                                         | 2  | 0  | 0  |
| 2         | Представления молекулярных структур                                                       | 12                                        | 8  | 0  | 4  |
| 3         | Дескрипторы атомно-молекулярных систем                                                    | 4                                         | 4  | 0  | 0  |
| 4         | Методы машинного обучения в химии. Построение количественных моделей «структура-свойство» | 46                                        | 18 | 0  | 28 |

##### 5.1. Лекции

| № лекции | № раздела | Наименование или краткое содержание лекционного занятия                                                                              | Кол-во часов |
|----------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 1        | 1         | Введение в хемоинформатику. Хемоинформатика как научная дисциплина. Цели, задачи, объекты изучения хемоинформатики. Востребованность | 2            |

|            |   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |   |
|------------|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
|            |   | моделей строения вещества и их использование в прогнозах свойств. Сферы применения методов хемоинформатики.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |   |
| 2          | 2 | Представления молекулярных структур. Линейные представления SMILES, SMARTS, SLN. Представления с применением теории графов. Векторные представления. Матричные представления: матрица смежности, матрица расстояний, матрица инцидентности, матрица связей, матрица связей-электронов. Структуры Маркуша.                                                                                                                                                                                                                    | 2 |
| 3, 4, 5    | 2 | Трехмерные представления. Координатные представления. Молекулярные поверхности. Молекулярные формы. Обменные форматы файлов MOL, SDF, RXN, RDF, MOL2. Конвертация представлений: структура-линейное, структура-систематическое имя, двумерной структуры в трехмерную. Методы конформационного поиска. Методы молекулярного моделирования. Программы конвертации между представлениями. Представления химических реакций: как набор реагентов и продуктов, характеристик реакционного центра, разности продуктов и реагентов. | 6 |
| 6, 7       | 3 | Классификация дескрипторов атомно-молекулярных систем. Топологические дескрипторы. 3D дескрипторы. Электронные свойства и дескрипторы на их основе. Физико-химические и фармакофорные дескрипторы.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 4 |
| 8, 9       | 4 | Общие принципы построения количественных моделей и взаимосвязей «структура – свойство». Качественные и количественные показатели качества моделей «структура – свойство». Валидация моделей: принцип Сетубала, рекомендации Унгера-Ганча, примеры наилучших практик.                                                                                                                                                                                                                                                         | 4 |
| 10, 11, 12 | 4 | Методы машинного обучения. Краткая история. Основные понятия. Множественная линейная регрессия (MLR). Пошаговый метод MLR. Метод частичных наименьших квадратов (PLS). Метод ближайших соседей (k-NN). Метод опорных векторов (SVM). Деревья принятия решений.                                                                                                                                                                                                                                                               | 6 |
| 13         | 4 | Искусственные нейронные сети. Основные принципы построения и работы нейронных сетей. Обучение сети, переучивание.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 2 |
| 14         | 4 | Модели «структура-свойство» для разных типов химических объектов.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 2 |
| 15         | 4 | Программы для моделирования "Структура-свойство".                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 2 |
| 16         | 4 | Обзор методов моделирования 3D-QSAR И ND-QSAR.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 2 |

## 5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

## 5.3. Лабораторные работы

| № занятия | № раздела | Наименование или краткое содержание лабораторной работы                                                                                    | Кол-во часов |
|-----------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 3         | 2         | Кодировка состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES.                                                                       | 4            |
| 1         | 4         | Настройка пользовательского интерфейса. Расчетные и графические возможности системы Microsoft Excel.                                       | 4            |
| 2         | 4         | Предобработка данных для анализа в Microsoft Excel. Построение сводных таблиц. Макросы.                                                    | 4            |
| 4         | 4         | Аналитическая система Statistica, 1 часть. Настройка пользовательского интерфейса. Графические возможности системы.                        | 4            |
| 5         | 4         | Аналитическая система Statistica, 2 часть. Классификация данных.                                                                           | 4            |
| 6         | 4         | Аналитическая система Statistica, 3 часть. Количественные показатели качества регрессионных моделей. Предсказательные способности моделей. | 4            |
| 7         | 4         | Информационная система ISIDA, 1 часть. Построение индивидуальной модели MLR: настройка моделирования «структура – условие – свойство»      | 4            |

|   |   |                                                                                                                                                |   |
|---|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
|   |   | вещества».                                                                                                                                     |   |
| 8 | 4 | Информационная система ISIDA, 2 часть. Построение консенсусной модели: получение, статистические параметры, анализ ансамбля выбранных моделей. | 4 |

#### 5.4. Самостоятельная работа студента

| Выполнение СРС                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |         |              |
|--------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|--------------|
| Подвид СРС                                 | Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Семестр | Кол-во часов |
| Подготовка к дифференцированному зачету    | 1. Введение в хемоинформатику в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. Часть 2-4. 2. Персональный конспект лекций.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 2       | 7,5          |
| Оформление отчетов по лабораторным работам | 1. Боровиков, В. П. Программа STATISTICA для студентов и инженеров В. П. Боровиков. - 2-е изд. - М.: Компьютер-пресс, 2001. - 299,[1] с. ил, стр. 48-199. 2. Сайт автора программы ISIDA/QSPR <a href="http://vpsolovev.ru/programs/isidaqspr/">http://vpsolovev.ru/programs/isidaqspr/</a> 3. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Информатика ; ЮУрГУ <a href="http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&amp;key=000529140">http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&amp;key=000529140</a> (стр. 37, раздел 2) 4. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ <a href="http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&amp;key=000561875">http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&amp;key=000561875</a> (стр. 15, раздел 6) | 2       | 30           |

#### 6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

##### 6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

| № КМ | Се-местр | Вид контроля     | Название контрольного мероприятия | Вес | Макс. балл | Порядок начисления баллов                                                                                                                                                                                                                                                 | Учитывается в ПА  |
|------|----------|------------------|-----------------------------------|-----|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| 1    | 2        | Текущий контроль | Отчет по лабораторной работе №1   | 1   | 10         | Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов. Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:<br>- очное выполнение лабораторной | дифференцир зачет |

|  |  |  |  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |  |
|--|--|--|--|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  |  |  |  |  | <p>работы - 1 балл.</p> <p>- сдачу отчета в установленный срок</p> <p>- 1 балл.</p> <p>- отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов.</p> <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются незначительные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми</p> |  |
|--|--|--|--|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|

|   |   |                  |                                  |   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                      |
|---|---|------------------|----------------------------------|---|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
|   |   |                  |                                  |   | ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.<br>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.<br>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов. |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                      |
| 2 | 2 | Текущий контроль | Отчет по лабораторной работе № 2 | 1 | 10                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.<br>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:<br>- очное выполнение лабораторной работы - 1 балл.<br>- сдачу отчета в установленный срок - 1 балл.<br>- отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов.<br>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.<br>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.<br>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.<br>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В | дифференцир<br>зачет |

|   |   |                  |                                  |   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                      |
|---|---|------------------|----------------------------------|---|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
|   |   |                  |                                  |   | <p>целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов.</p> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                      |
| 3 | 2 | Текущий контроль | Отчет по лабораторной работе № 3 | 1 | 10                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | <p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.</p> <p>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- очное выполнение лабораторной работы - 1 балл.</li> <li>- сдачу отчета в установленный срок - 1 балл.</li> <li>- отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов.</li> </ul> <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие</p> | дифференцир<br>зачет |



|  |  |  |  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |  |
|--|--|--|--|--|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  |  |  |  |  | <p>1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на</p> |  |
|--|--|--|--|--|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|

|   |   |                  |                                  |   |    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                        |
|---|---|------------------|----------------------------------|---|----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|
|   |   |                  |                                  |   |    | 2 и более недель) - до 2 баллов.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                        |
| 4 | 2 | Текущий контроль | Отчет по лабораторной работе № 4 | 1 | 10 | <p>Лабораторная работа выполняется в компьютерном классе, оформляется отчет по проделанной работе индивидуально каждым студентом. Максимальный балл за работу составляет 10 баллов.</p> <p>Баллы за отчет по лабораторной работе начисляются за:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- очное выполнение лабораторной работы - 1 балл.</li> <li>- сдачу отчета в установленный срок - 1 балл.</li> <li>- отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме (заполнены все необходимые разделы), расчетно-графическая часть выполнена без ошибок, вывод составлен с учетом анализа результатов расчета - 8 баллов.</li> </ul> <p>7 баллов – работа выполнена в полном объеме, допускается наличие 1-2 незначительных ошибок, которые студент может самостоятельно устранить.</p> <p>6 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 85% случаев.</p> <p>5 баллов – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 80% случаев.</p> <p>4 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 75% случаев.</p> <p>3 балла – работа полностью оформлена, но имеются несущественные ошибки в расчетной/графической/описательной частях работы или в выводах. В целом, ответы являются верными в 70% случаев.</p> <p>2 балла – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 65 % случаев ответы являются</p> | дифференцирующий зачет |

|   |   |                          |                          |   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                          |
|---|---|--------------------------|--------------------------|---|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
|   |   |                          |                          |   | <p>верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>1 балл – в работе приведены ответы на поставленные вопросы и лишь в 60 % случаев ответы являются верными. Расчетно-графическая часть работы выполнена с грубыми ошибками, выводы не/частично отражают факт достижения цели работы.</p> <p>0 баллов – работа оформлена частично, либо выполнен не свой вариант задания.</p> <p>При оценивании качества работы преподавателем могут быть использованы «штрафы» за несвоевременное выполнение работ по неуважительной причине, нарушение сроков сдачи заданий (на 2 и более недель) - до 2 баллов.</p> |                          |
| 5 | 2 | Промежуточная аттестация | дифференцированный зачет | - | 5 <p>При оценке устного ответа используется следующая шкала оценивания:</p> <p>5 баллов – приведен полный ответ на вопрос.</p> <p>4 балла – в ответе изложено не менее 80% полного ответа, могут содержаться 1-2 ошибки;</p> <p>3 балла – в ответе изложено не менее 60% полного ответа;</p> <p>2 балла – ответ неполный, но при этом изложено не менее 40% полного ответа;</p> <p>1 балл – изложено менее 20% верного ответа на вопрос.</p> <p>0 баллов – ответ отсутствует.</p>                                                                                                                                                                                                               | дифференцированный зачет |

## 6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

| Вид промежуточной аттестации | Процедура проведения                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Критерии оценивания                     |
|------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| дифференцированный зачет     | <p>На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Студент может улучшить свой рейтинг, пройдя контрольное мероприятие промежуточной аттестации - дифференцированный зачет. Зачет проводится во время, указанное в расписании, в виде устного опроса. Студенту задаются 2 вопроса из разных тем курса. Студенту дается 60 минут на подготовку ответов. Затем студент озвучивает свои ответы.</p> | В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения |

### 6.3. Паспорт фонда оценочных средств

| Компетенции | Результаты обучения                                                                                                                                                                      | № КМ |   |   |   |   |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---|---|---|---|
|             |                                                                                                                                                                                          | 1    | 2 | 3 | 4 | 5 |
| ОПК-3       | Знает: основные понятия и определения хемоинформатики (типы молекулярных дескрипторов, QSPR - взаимосвязь "структура - свойство", построение и валидация моделей "структура - свойство") | +    | + | + | + | + |
| ОПК-3       | Умеет: строить QSPR модели, определять их достоверность, адекватность, статистическую значимость                                                                                         |      | + | + | + | + |
| ОПК-3       | Имеет практический опыт: кодировки состава и структуры молекул с помощью спецификации SMILES, поиска связи между структурой химических объектов и их свойствами                          | +    | + | + | + | + |

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

### 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

#### Печатная учебно-методическая документация

##### а) основная литература:

1. Боровиков, В. П. Прогнозирование в системе STATISTICA в среде Windows: Основы теории и интенсивная практика на компьютере Учеб. пособие для вузов по специальности "Прикладная математика" В. П. Боровиков, Г. И. Ивченко. - М.: Финансы и статистика, 2000. - 382 с. ил.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

##### б) дополнительная литература:

1. Боровиков, В. П. Программа STATISTICA для студентов и инженеров В. П. Боровиков. - 2-е изд. - М.: Компьютер-пресс, 2001. - 299,[1] с. ил
2. Баскин, И. И. Введение в хемоинформатику [Текст] Ч. 5 Информатика химических реакций в 5 ч. И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань: Издательство Казанского университета, 2017. - 242 с. ил.

##### в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

##### г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ [http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU\\_METHOD&key=000561875](http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875)
2. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал.

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Структура, правила оформления, порядок представления и защиты выпускной квалификационной работы по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата) и 04.04.01 Химия (уровень магистратуры) [Электронный ресурс] : метод. указания / Л. А. Сидоренкова, О. К. Шарутина, Е. И. Данилина ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ [http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU\\_METHOD&key=000561875](http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000561875)

2. Интегрированные пакеты прикладных программ: учеб. пособие по направлению "Приклад. информатика" / В. А. Конов, Е. Н. Горных ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Информатика ; ЮУрГУ [http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU\\_METHOD&key=000529140](http://www.lib.susu.ac.ru/ftd?base=SUSU_METHOD&key=000529140)

### Электронная учебно-методическая документация

| № | Вид литературы            | Наименование ресурса в электронной форме          | Библиографическое описание                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|---|---------------------------|---------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | Основная литература       | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Васильев, А. Н. Числовые расчеты в Excel : справочник / А. Н. Васильев. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 608 с. — ISBN 978-5-8114-1580-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/168874">https://e.lanbook.com/book/168874</a> (дата обращения: 08.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.                                                                    |
| 2 | Дополнительная литература | Учебно-методические материалы кафедры             | Григорьева Е.А, Барташевич Е.В. Влияние учета растворителя на качество моделирования основности для азотсодержащих соединений по шкале йода. Наука ЮУрГУ: материалы 68-й научной конференции. Секции естественных наук. ИЦ ЮУрГУ. 2016. С. 127-132. <a href="http://amsmod.susu.ac.ru/wp-content/uploads/2017/02/Nauka_SUSU_2016.pdf">http://amsmod.susu.ac.ru/wp-content/uploads/2017/02/Nauka_SUSU_2016.pdf</a>                                  |
| 3 | Дополнительная литература | Электронно-библиотечная система издательства Лань | Усманов, Р. Р. Статистическая обработка данных агрономических исследований в программе «STATISTICA» : учебно-методическое пособие / Р. Р. Усманов. — Москва : РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева, 2020. — 177 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/181217">https://e.lanbook.com/book/181217</a> (дата обращения: 11.10.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей. |

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)
2. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

| Вид занятий          | № ауд.  | Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий |
|----------------------|---------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лабораторные занятия | 707 (1) | Программа статистического анализа Statistica, Информационная система ISIDA/QSPR для построения количественных моделей «структура-свойство»       |