

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра аналитической химии и экспертизы

Авторы-составители: **Васянин Александр Николаевич**

Рабочая программа дисциплины

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ

Код УМК 95334

Утверждено
Протокол №4
от «20» мая 2021 г.

Пермь, 2021

1. Наименование дисциплины

Информационные технологии в химии

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление подготовки: **44.03.05** Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки)
направленность Химия и Биология

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Информационные технологии в химии** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) (направленность : Химия и Биология)

ПК.2 способен использовать систематизированные знания в соответствии с профилем педагогической деятельности

Индикаторы

ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) (направленность: Химия и Биология)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	13
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	14
Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку	28
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Письменное контрольное мероприятие (4)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (13 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Расчетная и математическая химия

Информационные технологии в решении расчетных задач химии. Типы химических расчетных задач. ПО для расчетов

Компьютерное моделирование в химии

Общие сведения о способах расчетов молекулярных структур и их свойств в химии. Неэмпирические (ab initio) и полуэмпирические способы расчетов. Специализированное ПО для расчетов и его особенности

Хранение и обработка данных в библиотеках Python NumPy

Различные типы расчетных задач в химии и способы их решения. Специализированное ПО для работы с научной графикой

Визуализация данных с помощью библиотеки Matplotlib

Системы компьютерной алгебры. Возможности для моделирования в химии. Решение некоторых типов расчетных задач

Химическая информация и работа с ней

Общее представление о химической информации, методах ее получения и обработки. Задачи обработки химической информации. Подходы к описанию связей "структура-свойства" (QSAR).

Молекулярный граф и структура химического соединения

Структура молекулы и ее отображение на молекулярный граф. Способы записи графа: матрица смежности. Преобразование структуры молекулы в матрицу смежности и обратно.

Способы кодирования структуры: форматы SMILES, InChI

Общая информация о способах кодирования структуры молекул. Запись структуры молекулы с помощью языка SMILES. Основные правила языка.

Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS

Поиск структур химических соединений в базах данных. Язык описания шаблонов для поиска SMARTS. Нечеткий поиск похожих структур

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Паничев, С. А. Математические модели в естественных науках: химия : учебное пособие для вузов / С. А. Паничев, Л. П. Паничева, С. С. Волкова. — 2-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2019 ; Тюмень : Издательство Тюменского государственного университета. — 265 с. — (Университеты России). — ISBN 978-5-534-11297-9 (Издательство Юрайт). — ISBN 978-5-400-01222-8 (Издательство Тюменского государственного университета). — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.ura.it.ru/bcode/444861>
2. Химические приложения топологии и теории графов/ред. Р. Кинг.-Москва:Мир,1987.-560.-Библиогр. в конце разд., Предм. указ.: с. 544-551

Дополнительная:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия/М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев.-М.:СОЛОН-Пресс,2005, ISBN 5-98003-188-X.-536.-Библиогр.: с. 528-532
2. Уроки работы в системе МАТНЕМАТІСА:[метод. указ.]/М-во образования и науки РФ, Перм. гос. ун-т; [сост.: Т. В. Норина].-Пермь:ПГУ,2005.-67.
3. Дьяконов, В. П. Mathematica 5.1/5.2/6 в математических и научно-технических расчетах / В. П. Дьяконов. — 2-е изд. — Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. — 744 с. — ISBN 978-5-91359-045-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/90395>
4. Скатецкий В. Г., Свиридов Д. В., Яшкин В. И. Математические методы в химии: учебное пособие для вузов/В. Г. Скатецкий, Д. В. Свиридов, В. И. Яшкин.-Минск:ТетраСистемс,2006, ISBN 985-470-434-3.-368.-Библиогр.: с. 365

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Информационные технологии в химии** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

1. Презентационные материалы (слайды по темам лекционных и лабораторных занятий);
2. Доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
3. Доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.
4. Приложение, позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов.
5. Программный пакет Microsoft Office (Word, Excel, Power Point).
6. Программы для демонстрации видео-материалов.
7. Программа просмотра интернет-контента.
8. Доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

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

Для проведения лекций необходима аудитория, оснащенная презентационной техникой (ноутбук/компьютер, мультимедиа-проектор, экран для презентаций) с соответствующим программным обеспечением.

Для проведения практических занятий необходим компьютерный класс, оснащенный персональными ЭВМ и соответствующим программным обеспечением. Состав оборудования определен в Паспорте компьютерного класса.

Для самостоятельной работы необходима аудитория, оснащенная компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет", обеспеченным доступом в электронную информационно-образовательную среду университета, а также помещения научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с

доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Информационные технологии в химии**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.2

способен использовать систематизированные знания в соответствии с профилем педагогической деятельности

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности</p>	<p>ЗНАТЬ: основные методы кодирования химической информации УМЕТЬ: применять эти методы на практике ВЛАДЕТЬ: способностью интерпретировать полученные результаты</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Отсутствие знаний Не знает основ дисциплины, необходимых при формировании компетенции Отсутствие умений Отсутствие навыков</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию Частично сформированные умения применять на практике кодирование химической информации, производить поиск по химическим структурам в базах данных Способен интерпретировать полученные результаты с минимальными ошибками</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы систематические знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы сформированные умения применять на практике кодирование химической информации, производить поиск по химическим структурам в базах данных Способен интерпретировать полученные результаты с минимальными ошибками</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Сформированные систематические знания основ кодирования химической информации; знает основные понятия, терминологию Сформированные умения применять на практике кодирование химической</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		Отлично информации, производить поиск по химическим структурам в базах данных Безошибочно интерпретирует полученные результаты

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 44 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 44 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности	Хранение и обработка данных в библиотеках Python NumPy Письменное контрольное мероприятие	Умение работать с ПО для создания научной графики
ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности	Визуализация данных с помощью библиотеки Matplotlib Письменное контрольное мероприятие	Умение работать с ПО для создания научной графики
ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности	Молекулярный граф и структура химического соединения Письменное контрольное мероприятие	Умение кодировать информацию о структуре молекулы с помощью SMILES.
ПК.2.1 применяет специальные научные знания в профессиональной деятельности	Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS Письменное контрольное мероприятие	Умение использовать с библиотеку RDKit для поиска в базах данных и расчёта дескрипторов

Спецификация мероприятий текущего контроля

Хранение и обработка данных в библиотеках Python NumPy

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Написана программа, импортирующая данные из внешнего файла — 6. Программа производит расчёт необходимых величин — 5.	11
По графику произведен расчет какого-либо параметра: коэффициентов линейной регрессии, точки пересечения прямой. За неверно выбранный способ расчета/расчет вычитается 3 балла.	6

Визуализация данных с помощью библиотеки Matplotlib

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
По представленным данным построен график. Баллы вычитаются за: 1. Неверный выбор координатной системы (категориальная ось вместо линейной) - 2 балла. 2. Неверный тип графика (линейная регрессия на заведомо нелинейных данных) - 2 балла	13
По графику произведен расчет какого-либо параметра: коэффициентов линейной регрессии, точки пересечения прямой. За неверно выбранный способ расчета/расчет вычитается 3 балла	6
Общее оформление. Баллы вычитаются за: 1. Неподписанная ось/оси - 3 балла. 2. Необозначенные точки - 3 балла. 3. Наличие соединений между точками при неупорядоченном их расположении - 2 балла	6

Молекулярный граф и структура химического соединения

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Задание 1. Ручное кодирование информации с помощью SMILES. Закодировать структуру строкой SMILES (10 баллов). Поиск биологически-активных свойств закодированной структуры (3 балла)	13
Задание 2. Кодирование информации с помощью SMILES. Работа с программой. Нарисовать в программе и закодировать строкой SMILES (9 баллов) выданную структуру. Поиск биологически-активных свойств закодированной структуры (3 баллов)	12

Поиск химической информации в базах данных. Язык запросов SMARTS

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

Показатели оценивания	Баллы
Программа импортирует соединения из внешнего файла, рассчитывает свойства. Фильтрация соединений по заданному критерию не производится	11
Программа верно накапливает статистику и выводит её на экран	7
Программа корректно фильтрует соединения по заданному критерию	7