

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им.И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

ОДОБРЕНО

Ученым советом

ИОС УрО РАН

«__» _____ 2015 г.

Протокол № __

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОС УрО РАН

академик РАН _____ В.Н. Чарушин

«__» _____ 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Хемоинформатика

Шифр и название направления подготовки **18.06.01 Химическая технология**

Направленность **05.17.04 Технология органических веществ**

Квалификация: **«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения: **Очная (Заочная)**

Статус дисциплины:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

Авторы:

старший научный сотрудник ИОС УрО РАН, к.х.н.
д.х.н., проф.

О.Ю. Субботина
Ю.Ю. Моржерин

Екатеринбург – 2015

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГТ к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования и с учетом рекомендаций к ОПОП ППО для подготовки аспиранта специальности 05.17.04 - Технология органических веществ.

1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ, ЕЕ МЕСТО В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ОСВОЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины – Формирование у аспирантов:

- понимания необходимости знания о современных аппаратных и программных средствах и использования этих знаний в управленческой и исследовательской деятельности;
- основных понятий, принципов построения, состава функциональных модулей информационных систем управления и исследования;
- понимания иерархической структуры и принципов функционирования компьютерных систем автоматизации научных исследований (АСНИ), автоматизированного проектирования (САПР), автоматизированного управления (АСУ);
- основ современной методологии решения типовых управленческих и исследовательских задач для различных уровней химико-технологической систем с использованием пакетов прикладных программ.

Задачи дисциплины – Сформировать у аспирантов способность и готовность самостоятельно использовать математическое моделирование и информационные технологии в профессиональной деятельности, в том числе:

- приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения;
- эксплуатировать современное оборудование и приборы в соответствии с направлением и профилем подготовки;
- использовать методы математического моделирования для создания материалов и технологических процессов, в теоретическом анализе и экспериментальной проверке теоретических гипотез;
- строить и использовать модели для описания прогнозирования различных явлений, осуществить их качественный и количественный анализ;
- использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ;
- применять современные компьютерно-информационные технологии для сбора, анализа и оценки новейших научных и технологических разработок с целью внедрения в технологический, образовательный и научный процессы.

1.2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДАННОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

знать:

- иерархическую структуру и принципы функционирования компьютерных систем автоматизации научных исследований (АСНИ), автоматизированного проектирования (САПР), автоматизированного управления (АСУ), применяемые в них алгоритмы и критерии оптимальности
- знать современные автоматизированные средства проектирования
- современные методики обучения
- современные мультимедийные технологии обучения;

уметь:

- применять методы и алгоритмы оптимизации, а также соответствующие пакеты прикладных программ для оптимизации задач исследования, проектирования и управления химическим производством

- обрабатывать и систематизировать исходную информацию

- правильно выбирать и использовать для расчетов современные средства автоматизированного проектирования

- правильно оценивать результаты расчетов

- правильно выбирать и использовать для подготовки проектной и рабочей технической документации современные информационные средства

- эффективно использовать современные методы активного обучения

- использовать современные мультимедийные технологии обучения;

владеть:

- современными автоматизированными средствами проектирования

- современными методами активного обучения

- современными мультимедийными технологиями обучения.

1.3 МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ППО

«Хемоинформатика» является факультативной дисциплиной ОПОП ППО раздела ФД.А.00.

Обеспечивает подготовку выпускников к области профессиональной деятельности по специальности 05.17.04 –Технология органических веществ.

2 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**2.1 ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ (В ЧАСАХ И ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦАХ)**

Форма обучения (вид отчетности) - 2 год аспирантуры; вид отчетности – экзамен кандидатского минимума.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
Трудоемкость изучения дисциплины	144 / 4
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)	72 / 2
в том числе:	
лекции	18 / .0.5
практические занятия	
лабораторные работы	54 / 1.5
Самостоятельная работа аспиранта (всего)	72 / 2
в том числе:	
Подготовка к практическим занятиям	0
Подготовка реферата	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	72/ 2

2.2 РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Введение	1	0	0	0
2	Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	4	0	12	10
3	Молекулярные дескрипторы	4	0	12	10
4	Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR	4	0	18	32
5	Корпоративные информационные системы управления предприятием	3	0	6	10
6	Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач	2	0	6	10
<i>Итого:</i>		18	0	54	72

2.3 ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС

Тема 1. Введение.

История применения компьютерных технологий в химии и химической технологии

Тема 2. Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур.

Принципы представления химических структур в компьютерном виде. Линейное, табличное представления, Международные стандарты представления молекул: mol, sdf, rdf, cif, pdb, InChI? InChI-Key. Алгоритм Моргана.

Тема 3. Молекулярные дескрипторы.

Типы молекулярных дескрипторов: элементарные, физико-химические, топологические, электронные, геометрические и химические дескрипторы

Тема 4. Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR.

Основные примеры вычислительных методов и программ, используемых для направленного молекулярного дизайна лекарств

Тема 5. Корпоративные информационные системы управления предприятием.

Международные стандарты управления MRP II и ERP и др. Корпоративные информационные системы (1С:Предприятие, БОСС Корпорация, Галактика, СytiLine, Oracle Application, Ваan, R/3 и др.). Использование Интернет/Инtranет технологии для реализации модуля оперативного управления. Полнофункциональное представительство предприятия в Интернете. Интегрированные пакеты для офиса. Пакеты прикладных программ организации документооборота. Пакеты прикладных программ для математического анализа данных.

Тема 6. Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач.

Понятие химико-технологической системы (ХТС). Типовые задачи уровня ХТС - химический комбинат, химический завод. Расчеты критериев инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий. Компьютерные программы, реализующие эмпирический подход к компьютерному синтезу: LHASA (Logic and Heuristic Applied to Synthetic Analysis), SECS (Simulation and Evaluation of Chemical Synthesis), REACT (REACTION path synthesis program for the petrochemical industry), SynGen (SYNthesis GENeration), SYNCHEM (SYNthetic CHEMistry), WODCA (Workbench for the Organization of Data for Chemical Applications), EROS (Elaboration of Reactions for Organic Synthesis), TOSCA (Topological Synthesis design by Computer Application).

2.4 ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ

2.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Наименование работы	Объем учебного времени, час. / зачетные единицы
Презентация и компьютерная манипуляция молекулярных структур	Презентация структур и реакций в системе SMILES и SMARTS	6 / 0.16
Равновесие и скорость реакции	Презентация структур в системе WLN и InChI	6 / 0.17
Молекулярные дескрипторы	Расчет электронных дескрипторов с использованием программ квантово-химических расчетов	6 / 0.17
Молекулярные дескрипторы	Расчет топологических дескрипторов	6 / 0.17
Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR.	Построение модели QSAR для биологической активности	9 / 0.25
Расчетные методы количественной зависимости структура – активность (свойство) QSAR/QSPR.	Проверка модели QSAR	9 / 0.25
Корпоративные информационные системы управления предприятием	Поиск научной и технической информации в Интернете	6 / 0.17

Использование информационных технологий для решения типовых инженерно-экологических и управленческих задач.	Расчеты критериев инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий	6 / 0.16
Итого		54 / 1.5

3 ОРГАНИЗАЦИЯ ТЕКУЩЕГО И ПРОМЕЖУТОЧНОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ

3.1 КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.2 СПИСОК ВОПРОСОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.3 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- библиография по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- публикации (в том числе электронные) источников по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам строения и реакционной способности органических соединений;

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

3.3.1 ПОДДЕРЖКА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Электронные образовательные ресурсы

<http://www.scopus.com> – База данных по научным публикациям

http://www.talete.mi.it/dragon_net.htm - программа расчета молекулярных

дескрипторов

<http://www.citforum.ru> – Сервер информационных технологий.

<http://www.osp.ru> – Издательство “Открытые системы”.

<http://www.softlist.ru> – Каталог программ российских разработчиков.

<http://www.microsoft.com/rus> – Сайт корпорации Microsoft в России.

<http://www.oracle.ru> – Сайт корпорации ORACLE в России.

<http://www.oramag.ru> – Электронный журнал об ORACLE.

<http://www.e-commerce.ru> – Информационно-консалтинговый центр по электронной коммерции.

<http://www.mags.ru> – Электронная коммерция.

<http://www.russianenterprisesolutions.com> – Планета КИС (Корпоративные информационные системы управления)

<http://www.statsoft.ru> – Статистический портал.

<http://www.exponenta.ru> – Образовательный математический сайт.

<http://www2.chemie.uni-erlangen.de/software/eros/> - Портал компьютерного дизайна органических реакций

<http://www.bioinformatix.ru/> - Портал биоинформатики

Программное обеспечение

Пакеты программ:

- ChemOffice
- ISISDraw

- MS Office
- ChemCad

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

<http://www.scopus.com> – База данных по научным публикациям

www.reaxys.com - База Beilstein и Gmelin

<http://www.bioinformatix.ru/> - Портал биоинформатики

3.3.2 ТЕМАТИКА РЕФЕРАТОВ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ - проводится в виде экзамена кандидатского минимума.

4 ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ И КОНТРОЛЯ, ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВМ (*Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов*).

Программы пакета Microsoft Office;

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

5 АКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ (ДЕЛОВЫЕ ИГРЫ, НАУЧНЫЕ ПРОЕКТЫ) - НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

6 МАТЕРИАЛЬНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*)

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы.

7 ЛИТЕРАТУРА

7.1 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin^ Springer, 2003. 649 p.
2. R. Todeschini, V. Consonni. Molecular Descriptors for Chemoinformatics (2 volumes). Wiley-VCH, 2009
3. Павлов А.Н. Биоинформатика. М.: Гринлайт, 2010. 254 с.

7.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

A.R. Leach, V.L.Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.

7.3 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Нейн Ю.И., Иванцова М.Н., Моржерин Ю.Ю. Компьютерное представление органических молекул. Екатеринбург: УрФУ, 2012.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ

за _____ / _____ учебный год

В рабочую программу курса ФД.А.01, «Хемоинформатика», цикл ФД.А.00 «Факультативные дисциплины» основной образовательной программы подготовки аспиранта по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ (отрасль - технические науки), вносятся следующие дополнения и изменения:

Номер изменения	Номера листов		Основание для внесения изменений	Подпись	Расшифровка подписи	Дата	Дата введения изменения
	замененных	новых аннулированных					