

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Б1.О.22
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Большие данные в химии

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки
04.03.01 Химия

направленность (профиль)
Медицинская и фармацевтическая химия

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 1 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	4	Итого
Форма контроля	зачет с оценкой	
Вид занятий		
Лекции	—	—
Лабораторные	—	—
Практические	16	16
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,25	0,25
Контактная работа	16,25	16,25
Самостоятельная работа	19,75	19,75
Контроль	—	—
Итого	36	36

Рабочую программу составил(и):

доцент, Бунев А.С.
профессор, к.б.н., Хоченков Д.А.
доцент, к.м.н., Петров А.В.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана
направления подготовки

04.03.01 Химия

Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2030 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании Центра медицинской химии

(протокол заседания № 1 от «28» августа 2025 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Большие данные в химии» сформировать у студентов знания об информационных системах, профессиональных базах данных и специализированном программном обеспечении для решения профессиональных задач в избранной области химии.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Органическая химия и основы органического синтеза».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Медицинская химия», «Биохимия клетки», «Основы молекулярного дизайна биологически активных соединений», «Основы молекулярного моделирования биологически активных соединений», «Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы».

3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК–1 Способен планировать и осуществлять направленный органический синтез биологически активных соединений на основе современных подходов структурно–ориентированного и лиганд–ориентированного молекулярного дизайна под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК–1.1 Выбирает и использует основные подходы в структурно–ориентированном и лиганд–ориентированном молекулярном дизайне, достижения в этой области и возможные пути развития направленного синтеза для решения поставленных задач НИР	Знать: основные базы библиографических данных (Scopus, PubMed, Web of Science) и базы данных химических соединений и реакций (Reaxys, SciFinder)
		Уметь работать с основными базами библиографических данных (Scopus, PubMed, Web of Science) и базами данных химических соединений и реакций (Reaxys, SciFinder)
		Владеть основными методологическими подходами поиска химической информации для профессиональной деятельности
	ПК–1.2 Планирует и проводит отдельные стадии исследования по синтезу заданной структуры биологически активного соединения в рамках структурно–ориентированного и лиганд–ориентированного подхода, при наличии общего плана НИР	Знать: основные типы программного обеспечения и специализированных баз данных, необходимых для работы профессионального химика. Уметь: используя знания в области органического синтеза планировать сложные многостадийные синтетические схемы получения фармакологически активных соединений с использованием баз данных химических реакций (Reaxys/SciFinder) Владеть: навыками использования современного программного обеспечения и профессиональных

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
		баз данных для решения задач в избранной области химии
ПК–4 Способен осуществлять конструирование биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем на основе современных представлений медицинской химии под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК–4.1 Планирует отдельные стадии исследования по молекулярному дизайну с применением современного программного обеспечения, при наличии общего плана НИР	Знать базы данных результатов химико-биологических исследований (в первую очередь на основе открытых ресурсов Национального института здоровья США)
		Уметь использовать (генерация запроса, выборка и обработка результата) базы данных результатов химико-биологических исследований (в первую очередь на основе открытых ресурсов Национального института здоровья США)
		Владеть подходами составления сложных многопараметрических запросов в базы оперирующими большими данными
	ПК–4.2 Реализует эксперименты по молекулярному моделированию с применением современных методов молекулярного докинга и QSAR–анализа для решения поставленных задач НИР.	Знать: основные методологические подходы, используемые при молекулярном дизайне с применением специализированного программного обеспечения Уметь: представлять химические данные для последующей компьютерной обработки Владеть: навыками работы на основных открытых программных продуктах, предназначенных для молекулярного моделирования.

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
Модуль 1.	Пр 1	Большие данные: структурированные и не структурированные химико-биологические данные	4	2	—	—	—
	Пр 2	Библиографические базы данных. Scopus	4	1	—	—	—
	Пр3	Библиографические базы данных. Web of Science	4	1	—	—	—
	Пр 4	Библиографические базы данных. PubMed	4	2	—	—	—
	Пр 5	Базы данных химических реакций. Reaxys	4	2	—	—	—
	Пр 6	Базы данных химических реакций. SciFinder	4	2	—	—	—
	Пр 7	Большие данные как источник информации для QSAR	4	2	—	—	—
	Пр 8	Большие данные для фармацевтической индустрии	4	2	90	—	Коллоквиум
	Ср	Подготовка к итоговому тестированию	4	19,75	—	—	—
	Псщ	Посещаемость занятий	4	—	10	—	—
	ПА	Промежуточная аттестация	4	0,25	—	—	Вопросы к зачету № 1–40

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	ТИ	Итоговое тестирование	4	2	100	—	Тестовые задания
Итого:				36	200		

Схема расчета итогового балла $\langle (\text{Сумма} + T_{\text{cp}})/2 \rangle$ – сумма баллов по всем учебным мероприятиям, предусмотренным в курсе + среднее арифметическое по всем промежуточным тестам, проводимым через ОТ.

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – практические занятия, а также самостоятельная работа. Практические занятия акцентированы на наиболее принципиальных и проблемных вопросах курса и призваны стимулировать выработку практических умений.

Оценивание знаний студентов производится по балльно–рейтинговой системе.

6. Методические указания по освоению дисциплины

Особо значимой для профессиональной подготовки студентов является самостоятельная работа по курсу. Самостоятельная работа – это совокупность всей самостоятельной деятельности студентов, как в учебной аудитории, так и вне ее, в контакте с преподавателем и в его отсутствии.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий.
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания – консультации по учебным вопросам и при выполнении творческих и индивидуальных заданий.
- в виде внеаудиторной самостоятельной работы.

Самостоятельная работа студентов предполагает более углубленное освоение материалов курса, выносимых на самостоятельное изучение, а также творческих заданий, связанных с образовательной и научной исследовательской деятельностью.

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
4	ПК–1; ПК–4	Вопросы к зачету 1–40 Тестовые задания

7.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.2.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 4

№ п/п	Вопросы к зачету с оценкой
1	Химические данные. Способы представления и обработки.
2	Фингерпринты и химическая формула.
3	Количественные соотношения структура – свойства. Общее описание и границы применимости.
4	Количественные соотношения структура – свойства. Требования к входным данным.
5	Количественные соотношения структура – свойства. Требования к данным обучающей и стандартной выборки.
6	Хемоинформатика. Определение и основные разделы.
7	Библиографическая база Scopus. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса.
8	Библиографическая база Web Of Science. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса.
9	Библиографическая база PubMed. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса.
10	Специализированная база данных Reaxys. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса.
11	Специализированная база данных SciFinder. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
12	Простые и многопараметрические запросы.
13	Специализированная база данных ZINC. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса.
14	Специализированная база данных ChemSpider. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
15	Специализированная база данных PubChem. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
16	Специализированная база данных Protein Data Bank. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
17	Специализированная база данных ChemEMBL. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
18	Специализированные базы данных Национального института здоровья США. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
19	Специализированное программное обеспечение ChemDraw. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
20	Специализированное программное обеспечение Schrodinger Suite. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
21	Специализированное программное обеспечение Chimera X Daily. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и

	генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
22	Специализированное программное обеспечение OpenBabel. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
23	Специализированное программное обеспечение Avagadro. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
24	Специализированное программное обеспечение JSMol. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
25	Специализированное программное обеспечение MolSketch. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
26	Специализированное программное обеспечение ChemDoodle. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
27	Специализированное программное обеспечение NWChem. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
28	Специализированное программное обеспечение Centera. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
29	Специализированное программное обеспечение GAMESS. Общее описание. Описание функционала программного продукта. Описание обрабатываемых и генерируемых данных. Основные профессиональные задачи, в решении которых помогает данное программное обеспечение.
30	Специализированная база данных GOSTAR. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
31	Специализированная база данных AZ IBIS. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
32	Специализированная база данных OCHEM. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
33	Специализированная база данных ChEMBL. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
34	Специализированная база данных BindingDB. Общее описание. Описание набора учитываемых данных. Требование к формированию запроса
35	Виртуальное химическое пространство как пример больших данных.
36	Аннотированные коммерческие комбинаторные библиотеки
37	Машинное обучение. Основные принципы и математический аппарат. Применение в химических науках.
38	Онлайн-инструменты хемоинформатики. Описание и возможные области применения.
39	Нейронные сети. Основные принципы и математический аппарат. Применение в разработке лекарств.
40	Данные скрининга in vitro. Общие подходы к оценке получаемых данных.

7.2.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
4	Зачет с оценкой (по накопительному рейтингу)	«отлично»	Текущий рейтинг составляет 85–100 баллов
		«хорошо»	Текущий рейтинг составляет 70–84 баллов
		«удовлетворительно»	Текущий рейтинг составляет 55–69 баллов
		«неудовлетворительно»	Текущий рейтинг составляет 0–54 баллов

8. Учебно–методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно– методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Ланских Ю. В.	Введение в большие данные : учебное пособие / Ю. В. Ланских, В. Г. Ланских, К. В. Родионов. – Киров : ВятГУ, 2023. – 172 с.	Учебное пособие	2023	ЭБС «Лань»
2	Егорова А.А	Основы работы с большими данными (Data science) [Текст] : учебно-методическое пособие по выполнению лабораторных работ / А.А. Егорова. – М.: ИД Академии Жуковского, 2023. – 48 с.	Учебник	2023	ЭБС «Лань»
3	Тесленко И.Б.	Анализ больших данных : учебное пособие / И. Б. Тесленко, В. Е. Крылов, А. М. убернаторов [и др.]. – Москва : КноРус, 2025. – 295 с. – ISBN: 978-5-406-14006-2	Учебное пособие	2025	ЭБС «

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно– методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- Web of Science [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: apps.webofknowledge.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: scopus.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: elibrary.ru. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: link.springer.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: sciencedirect.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС «IPRbooks» (права принадлежат ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа»), договор № 620 от 15.06.2021 г. с 01.08.2021 по 01.08.2022 (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>) – содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно–практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания – за последние 10 лет.

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно; контракт № 1653 от 14.12.2018, срок действия – бессрочно
2	Office Standard: Office Stdandard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition	договор № 690 от 19.05.2015, срок действия – бессрочно

8.5. Описание материально–технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А–215	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
2	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А–306	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
3	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. УЛК–812	Столы ученические, стол преподавательский, стулья ученические, доска аудиторная (маркерная), ПК с выходом в сеть Интернет
4	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г–401	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.