

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ**

**ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта»**

**УТВЕРЖДАЮ**

**Ректор БФУ им. И. Канта**



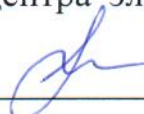
\_\_\_\_\_**М.В. Демин**

«11» июня 2026 г.

**Дополнительная профессиональная программа  
(программа профессиональной переподготовки)**

**«Цифровое моделирование химических процессов»**

**Директор центра электронного обучения**

\_\_\_\_\_ **Ю.Ю. Лёвкина**

Калининград 2026

— — —  
**Лист согласования**  
**дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки**  
**«Цифровое моделирование химических процессов»**

Григорьев Александр  
ФИО  
Александрович

Директор по производству  
должность, наименование компании  
(организации)

17.06.2026  
дата, подпись, печать



**Лист согласования**  
**дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки**  
**«Цифровое моделирование химических процессов»**

Бойко Антон Александрович  
ФИО

Директор ООО «ИНФАМЕД К»  
должность, наименование компании  
(организации)

11.06.2026

дата, подпись, печать



Лист согласования  
дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки  
«Цифровое моделирование химических процессов»

*Кривогорев Александр*  
ФИО

*генеральный директор  
ООО "Мультистаторные  
системы"*

должность, наименование компании  
(организации)



## Аннотация

Дополнительная профессиональная программа профессиональной переподготовки ИТ-профиля (далее – Программа) предназначена для студентов высших учебных заведений, обучающихся по очной и очно-заочной форме за счет бюджетных средств или по договорам об оказании платных образовательных услуг, освоивших в объеме не менее 1 курса бакалавриата (бакалавры 2 курса и выше) и/или программы специалитета в объеме не менее 1 курса (специалисты 2 курса и выше), и/или программы магистратуры (магистранты любого курса) по специальностям и направлениям подготовки, не отнесённым к ИТ-сфере, а именно:

- 04.03.01 Химия
- 04.04.01 Химия
- 06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика

Целью профессиональной переподготовки является получение актуальной для отрасли химия (органический синтез, конструирование лекарств, химические источники тока) и здравоохранение (фармакология) дополнительной ИТ-квалификации «Специалист в области применения цифровых технологий в химической отрасли и фармацевтике».

Нормативный срок освоения программы 286 часов при очной форме подготовки с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий.

Формы и методы обучения:

Лекционный материал по программе преимущественно представлен в виде записанных и размещенных заранее видеолекций, которые дополнены текстовыми материалами и презентациями с возможностью скачивания. Данный формат организации лекционных занятий снижает аудиторную нагрузку студентов и позволяет осваивать теоретический материал в комфортном для обучающихся темпе, эффективно совмещая освоение ДПП ПП с обучением по основной профессиональной образовательной программе.

Контактная работа представлена преимущественно практическими занятиями и проводится по заранее утвержденному расписанию. Практические занятия реализуются в формате совместного выполнения заданий, решения кейсов, демонстрации и обсуждения выполнения практических заданий.

Практика организована при сотрудничестве с ООО «ИНФАМЕД К» и АО «Отисифарм Про» в виде индивидуальных или коллективных проектов.

В ходе обучения по каждому модулю выставляется зачет на основании просмотров видеолекций, посещения практических занятий, выполнения заданий и онлайн-тестирования. Зачет по практике выставляется на основании выполнения индивидуального или коллективного проекта. Итоговая аттестация по программе проводится в формате онлайн-тестирования и выполнения проектной работы.

Программа реализуется с применением технологий электронного обучения – с использованием онлайн-курса «Цифровое моделирование химических процессов» на платформе онлайн-обучения БФУ им. И. Канта [lms.kantiana.ru](https://lms.kantiana.ru) и сервиса видеоконференцсвязи «Яндекс Телемост».

Авторы и преподаватели:

| ФИО, должность                                                                                                                                                                                                                            | Модули (темы, лекции)                                                                                                                             | Часов, всего |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Фукс Ирина Львовна, ведущий программист отдела информационного обеспечения Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                                                                                                       | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 1 «Цифровая культура»                                                                | 16 ч.        |
| Трофимова Светлана Федоровна, ведущий программист отдела информационного обеспечения Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                                                                                             | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 2 «Дискретная математика в программировании», Раздел 3 «Введение в программирование» | 16 ч.        |
| Литовченко Марина Игоревна, ассистент кафедры программной инженерии Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                                                                                                              | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 3 «Алгоритмизация. Базовые понятия программирования (на примере языка Fortran)»      | 16 ч.        |
| Буркатовская Юлия Борисовна, доцент кафедры системного анализа и математического моделирования Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                                                                                   | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 4. Прикладное программирование (на примере языка Python)                             | 24 ч.        |
| Лещинская Мария Анатольевна, старший преподаватель кафедры математического анализа и теории функций, Механико-математический факультет, ТГУ                                                                                               | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии» Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии                              | 18 ч.        |
| Пчелинцев Евгений Анатольевич, д-р физ.-мат. Наук, заведующий кафедрой математического анализа и теории функций, Механико-математический факультет, ТГУ                                                                                   | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии» Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии                              | 18 ч.        |
| Фещенко Артем Викторович, директор Центра технологического и исследовательского сопровождения (ЦТИС), начальник отдела разработки и коммерциализации цифровых решений ЦТИС Института дистанционного образования, ТГУ                      | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 2. Базы данных и программные продукты                                               | 36 ч.        |
| Курзина Ирина Александровна, доктор химических наук, профессор, заведующая кафедрой природных соединений, фармацевтической и медицинской химии химического факультета, директор центра исследований в области материалов и технологий ТГУ | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 3. Моделирование структуры веществ и материалов в программе USPEX                   | 12 ч.        |
| Хлебников Андрей Иванович, доктор химических наук, профессор кафедры природных соединений, фармацевтической и медицинской химии ТГУ                                                                                                       | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул                                | 10 ч.        |
| Оганов Артем Ромаевич, руководитель лаборатории дизайна материалов, Сколтех                                                                                                                                                               | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул                                | 6 ч.         |
| Чупахин Евгений Геннадьевич, кандидат химических наук, доцент высшей школы живых систем БФУ им. И. Канта                                                                                                                                  | Модуль 3. Компьютерный дизайн в открытии лекарств, Модуль «Практика»                                                                              | 70 ч.        |
| Анищенко Юлия Владимировна, к.т.н., доцент Институт «Умные материалы и технологии» ТГУ                                                                                                                                                    | Модуль «Практика»                                                                                                                                 | 18 ч.        |

## **I. Общие положения**

### ***I.1. Нормативная правовая основа Программы:***

Федеральный закон от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации»;

постановление Правительства РФ от 11 октября 2023 г. № 1678 «Об утверждении Правил применения организациями, осуществляющими образовательную деятельность, электронного обучения, дистанционных образовательных технологий при реализации образовательных программ»;

приказ Минобрнауки России от 1 июля 2013 г. № 499 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по дополнительным профессиональным программам»;

приказ Минобрнауки России от 19 октября 2020 г. № 1316 «Об утверждении порядка разработки дополнительных профессиональных программ, содержащих сведения, составляющие государственную тайну, и дополнительных профессиональных программ в области информационной безопасности» (далее – приказ Минобрнауки России № 1316);

методические рекомендации по разработке основных профессиональных образовательных программ и дополнительных профессиональных программ с учетом соответствующих профессиональных стандартов (утв. Минобрнауки России 22 января 2015 г. № ДЛ-1/05вн);

приказ Минобрнауки России от 19 октября 2020 г. № 1316 «Об утверждении порядка разработки дополнительных профессиональных программ, содержащих сведения, составляющие государственную тайну, и дополнительных профессиональных программ в области информационной безопасности»;

федеральный государственный образовательный стандарт 04.03.01 Химия (далее вместе – ФГОС ВО);

профессиональный стандарт «Программист» (регистрационный номер 06.001), утвержден приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 20.07.2022 № 424н.

Целью ДПП ПП является формирование у слушателей, обучающихся по специальностям и направлениям подготовки, не отнесенным и отнесённым к ИТ-сфере, согласно приложению к Методике расчета показателя «Количество принятых на обучение по программам высшего образования в сфере информационных технологий за счет бюджетных ассигнований федерального бюджета (нарастающим итогом, начиная с 2021 года)», утвержденной приказом Минцифры России от 28 февраля 2022 г. № 143, цифровых компетенций, необходимых для выполнения нового вида профессиональной деятельности в соответствии с перечнем областей цифровых компетенций: программирование и создание ИТ-продуктов, новые производственные технологии.

### ***I.2. Термины и определения, используемые в Программе***

*Итоговая аттестация (аттестация)* – оценка степени и уровня освоения обучающимися ДПП ПП или ИТ-модуля в формате демонстрационного экзамена, предусматривающая выполнение обучающимися профессиональных задач и оценку результатов и (или) процесса выполнения – проверку сформированности цифровых компетенций в ходе обучения по ДПП ПП или ИТ-модулям.

*Демонстрационный экзамен* – аттестационное испытание, предусматривающее выполнение профессиональных задач и оценку результатов и (или) процесса выполнения профессиональных задач для подтверждения применения обучающимися цифровых компетенций на практике.

Дистанционные образовательные технологии – это образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) взаимодействии обучающихся и педагогических работников.

*Дополнительная профессиональная программа профессиональной переподготовки (Программа)* – комплекс основных характеристик образования (объем, содержание, планируемые результаты) и организационно-педагогических условий, который представлен в виде учебного плана, календарного учебного графика, рабочих программ учебных курсов, дисциплин (модулей), оценочных и методических материалов, а также программ учебной и производственной практик, стажировок и форм аттестации, иных компонентов и обеспечивает приобретение дополнительной квалификации. Программа может разрабатываться с учетом положений профессиональных стандартов, федеральных государственных образовательных стандартов, требований рынка труда (индустрии).

*Знание (З)* – информация о свойствах объектов, закономерностях процессов и явлений, правилах использования этой информации для принятия решений, присвоенная обучающимся на одном из уровней, позволяющих выполнять над ней мыслительные операции.

*Матрица компетенций* – матрица компетенций, актуальных для цифровой экономики, с приоритетом компетенций в ИТ-сфере, разработанная Университетом Иннополис при участии ИТ-компаний и университетов-участников программы «Приоритет-2030», представляющая собой перечень компетенций, структурированный по сферам применения, типу компетенций, уровням их сформированности и характеристикам.

*Междисциплинарный курс (МДК)* – структурный элемент Программы или программы профессионального модуля, предназначенный для формирования знаний и умений, объединенных по прагматическим основаниям с нарушением академических границ отраслей знаний.

*Опыт практической деятельности (ОПД)* – образовательный результат, включающий выполнение обучающимся деятельности, завершающейся получением результата / продукта (элемента продукта), значимого при выполнении трудовой функции, в условиях реального производства или в модельной ситуации.

*Оценочные средства (ОС)* – дидактические средства для оценки качества подготовленности обучающихся.

*Практика (практическая подготовка)* – форма организации образовательной деятельности при освоении образовательной программы в условиях выполнения обучающимися определенных видов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью и направленных на формирование, закрепление, развитие практических навыков и компетенции по профилю соответствующей образовательной программы.

*Профессиональный модуль (ПМ)* – структурный элемент Программы, предназначенный для формирования определенной компетенции или нескольких компетенций.

*Рабочая программа* – нормативный документ в составе Программы, регламентирующий взаимодействие преподавателя и обучающихся в ходе учебного процесса при реализации структурных элементов Программы (модуль, дисциплина, курс).

*Стажировка* – формирование и закрепление полученных в результате теоретической подготовки профессиональных знаний и умений в рамках выполнения практических заданий (функций) на базе профильной компании (организации). Допускается заключение срочных трудовых договоров, предусматривающих прохождение обучающимся оплачиваемой стажировки. Время прохождения стажировки целесообразно учитывать в качестве учебной или производственной практики.

*Умение (У)* – освоенный субъектом способ выполнения действия, обеспечиваемый совокупностью приобретенных знаний и навыков; операция (действие), выполняемая определенным способом и с определенным качеством (умение, выполнение которого доведено до автоматизма, является навыком).

*Учебная дисциплина (УД)* – структурный элемент Программы, предназначенный для формирования знаний и умений в соответствующей сфере профессиональной деятельности.

*Фонды оценочных средств (ФОС)* – совокупность оценочных средств, используемых на различных этапах педагогической диагностики.

- - -

*Целевой уровень сформированности компетенции* – определенный в соответствии с Матрицей цифровых компетенций и указанный в ДПП ПП и ИТ-модулях в качестве планируемого результата обучения уровень сформированности цифровой компетенции.

*Цифровая компетенция (компетенция)* – образовательный результат, формируемый при освоении ДПП ПП или ИТ-модулей и необходимый для приобретения дополнительной *ИТ-квалификации*, необходимой для выполнения нового вида деятельности по внедрению и (или) развитию, и (или) разработке цифровых технологий, в том числе алгоритмов и программ, пригодных для практического применения, в одной из приоритетных отраслей экономики.

*Электронное обучение* – организация образовательной деятельности с применением содержащейся в базах данных и используемой при реализации образовательных программ информации и обеспечивающих ее обработку информационных технологий, технических средств, а также информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу по линиям связи указанной информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников

### ***I.3. Требования к поступающим***

К обучению по Программе допускаются обучающиеся по очной или по очно-заочной форме за счет бюджетных средств или по договорам об оказании платных образовательных услуг, освоившие программы бакалавриата в объеме не менее 1 курса (бакалавры 2 курса) и/или программы специалитета в объеме не менее 1 курса (специалисты 2 курса), и/или программы магистратуры (магистры) по специальностям и направлениям подготовки в отрасли здравоохранение (медицина, фармакология, психология, физическая культура и спорт).

Студенты принимаются на обучение по ДПП ПП на основании освоения базового курса «Введение в алгоритмы: основы» (8 ч.), размещенного на онлайн-платформе БФУ им. И. Канта [lms.kantiana.ru](https://lms.kantiana.ru).

Индивидуальных образовательных траекторий в зависимости от специальности и направления подготовки студента по базовому образованию не предусмотрено.

### ***I.4. Квалификационная характеристика выпускника***

Выпускникам Программы присваивается дополнительная ИТ-квалификация «Специалист в области применения цифровых технологий в химической отрасли и фармацевтике».

Выпускник Программы будет готов к выполнению трудовой деятельности в области «Связь, информационные и коммуникационные технологии», согласно виду профессиональной деятельности «Создание и поддержка информационных систем (ИС)», описанным в профессиональном стандарте 06.042 «Специалист по большим данным» в качестве Аналитик, Исследователь данных, Руководитель отдела по информационным технологиям.

Квалификационный уровень по национальной рамке квалификаций: 3.

## II. Планируемые результаты обучения и структура Программы

Получение дополнительной ИТ-квалификации «Специалист в области применения цифровых технологий в химической отрасли и фармацевтике» обеспечивается формированием приведенных в таблице цифровых компетенций:

| Наименование сферы                         | ID и наименование компетенции                                                          | Инструменты профессиональной деятельности                                      | Целевой уровень формирования компетенций в Программе |                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                      |            |
|--------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
|                                            |                                                                                        |                                                                                | Минимальный (исходный)                               | Базовый                                                                                                                                                                                               | Продвинутый                                                                                                                                                                                                                                                          | Экспертный |
| Средства программной разработки            | ID 28 — применяет языки программирования для решения профессиональных задач            | Python, Fortran, Pandas                                                        | -                                                    | Применяет языки программирования для решения профессиональных задач под контролем более опытных специалистов                                                                                          | -                                                                                                                                                                                                                                                                    | -          |
| Средства программной разработки            | ID 30 – применяет принципы и основы алгоритмизации                                     | Python, Fortran, NumPy, Pandas, Matplotlib, SciPy                              | -                                                    | -                                                                                                                                                                                                     | Самостоятельно разрабатывает алгоритмы высокой сложности, использует доступный опыт других разработчиков (интернет, литература)                                                                                                                                      | -          |
| Основы инженерно-научных расчетов          | ID 15 применяет программные алгоритмы обработки данных для инженерно-научных расчетов  | Minitab, Glide, ComFA, LigandPrep, AlphaFold, NumPy, Pandas, Matplotlib, SciPy | -                                                    | Применяет программные алгоритмы обработки данных для инженерно-научных расчетов на уровне написания простых аналитических алгоритмов, используя стандартные библиотеки, при внешней постановке задачи | Применяет программные алгоритмы обработки данных для инженерно-научных расчетов, самостоятельно подбирает и использует для научных вычислений специализированные библиотеки. Разрабатывает программные алгоритмы с использованием методов математической оптимизации | -          |
| Прикладные программные комплексы и системы | ID 37 Применяет Искусственный интеллект и машинное обучение                            | Scikit-learn, XGBoost, AlphaFold, Schrodinger                                  | -                                                    | -                                                                                                                                                                                                     | Разрабатывает отдельные части проектов по применению искусственного интеллекта и машинного обучения                                                                                                                                                                  | -          |
| Новые производственные технологии          | ID 182 применяет новые технологии проектирования и поддержки жизненного цикла продукта | Maestro Shrodinger                                                             | -                                                    | -                                                                                                                                                                                                     | Применяет новые технологии проектирования и поддержки жизненного цикла продукта в производственной деятельности самостоятельно, на основе типовых вариантов, с учетом их свойств и пригодности к Конкретному производственному процессу,                             | -          |

|  |  |  |  |  |                                                  |  |
|--|--|--|--|--|--------------------------------------------------|--|
|  |  |  |  |  | при необходимости<br>консультируясь с экспертами |  |
|--|--|--|--|--|--------------------------------------------------|--|

### **II.1. Структура образовательных результатов**

Формирование цифровых компетенций, необходимых для получения обучающимися дополнительной ИТ-квалификации, обеспечивается последовательным формированием промежуточных образовательных результатов, начиная со знаний.

| ID и формулировка целевого уровня формирования компетенций                            | Промежуточные образовательные результаты                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                       | Опыт практической деятельности (ОПД)                                                                                                                                                                                                                                                        | Умения (У)                                                                                                           | Знания (З)                                                                                                                               |
| ID 28. Применяет языки программирования для решения профессиональных задач            | Применяет языки программирования для решения профессиональных задач под контролем опытных специалистов                                                                                                                                                                                      | Уметь писать скрипты для автоматизации профессиональных задач                                                        | Знает основы программирования, языки программирования и их применение                                                                    |
| ID 30. Применяет принципы и основы алгоритмизации                                     | Применяет принципы и основы алгоритмизации (Базовый уровень – «Разрабатывает типовые алгоритмы под контролем опытных наставников»)                                                                                                                                                          | Умеет формализовывать задачи в виде алгоритмов, реализовывать алгоритмы на языке программирования                    | Знает основные понятия алгоритмизации, базовые алгоритмические конструкции, структуры данных и их применение, основные алгоритмы         |
| ID 15 применяет программные алгоритмы обработки данных для инженерно-научных расчетов | Применяет программные алгоритмы обработки данных для инженерно-научных расчетов на уровне написания простых аналитических алгоритмов, построения регрессионных моделей, визуализации результатов расчетов, самостоятельно подбирая и используя для вычислений специализированные библиотеки | Умеет формализовывать задачу, использовать стандартные библиотеки, проверять корректность расчетов, строить графики. | Знает основы программирования для расчетов, стандартные библиотеки для анализа данных, форматы данных и их обработки, типы визуализаций. |
| ID 37 Применяет Искусственный интеллект и машинное обучение                           | Разрабатывает отдельные части проектов по применению искусственного интеллекта и машинного обучения                                                                                                                                                                                         | Умеет реализовывать пайплайн машинного обучения, применять кросс-валидацию, оценивать важность признаков.            | Знает алгоритмы регрессии и классификации, методы борьбы с переобучением, метрики ( $R^2$ , RMSE, ROC-AUC).                              |

|                                                                                        |                                                                                                                                                                                                |                                             |                                                                               |
|----------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| ID 182 применяет новые технологии проектирования и поддержки жизненного цикла продукта | Базовый уровень – Применяет новые технологии проектирования и поддержки жизненного цикла продукта в производственной деятельности на основе типовых рекомендаций при внешней постановке задачи | Умеет анализировать данные жизненного цикла | Знает основы жизненного цикла продукта, современные технологии проектирования |
|----------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|

## ***II.2. Структура Программы***

Структура Программы регулирует образовательные траектории обучающихся, последовательность освоения структурных элементов (разделов) Программы, соответственно, последовательность формирования всех образовательных результатов.

| Структурные элементы (разделы Программы)              | Шифры образовательных результатов  | Вариатив / инвариант и целевые группы обучающихся |
|-------------------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------------------|
| Модуль 1 «Алгоритмизации и языки программирования»    | ID 28, ID 30                       | Инвариант для всех групп обучающихся              |
| Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии» | ID 15, ID 28, ID 182               | Инвариант для всех групп обучающихся              |
| Модуль 3 «Компьютерный дизайн в открытии лекарств»    | ID 15, ID 37                       | Инвариант для всех групп обучающихся              |
| Практика                                              | ID 182, ID 30, ID 15, ID 28, ID 37 | Инвариант для всех групп обучающихся              |

### III. Учебный план Программы

Объем Программы составляет 286 часов.

Учебный план Программы определяет перечень, последовательность, общую трудоемкость разделов и формы контроля знаний.

| Структурные элементы (разделы Программы)                              | Общая трудоемкость, часов | Обязательная аудиторная учебная нагрузка |                                    |               | Самостоятельная работа, часов |                                    | Практики стажировки, часов | Промежуточная аттестация, часов |
|-----------------------------------------------------------------------|---------------------------|------------------------------------------|------------------------------------|---------------|-------------------------------|------------------------------------|----------------------------|---------------------------------|
|                                                                       |                           | всего, часов                             | в т.ч. практические занятия, часов | лекции, часов | всего, часов                  | в т.ч. практические задания, часов |                            |                                 |
| <b>Модуль 1 «Алгоритмизации и языки программирования»</b>             | <b>72</b>                 | <b>46</b>                                | <b>28</b>                          | <b>18</b>     | <b>24</b>                     | <b>10</b>                          |                            | <b>2</b>                        |
| <i>Раздел 1. Цифровая культура</i>                                    | 14                        | 10                                       | 4                                  | 6             | 4                             | 2                                  |                            |                                 |
| Тема 1. Цифровые устройства, предназначенные для работы с информацией | 3                         | 2                                        | 0                                  | 2             | 1                             | 0                                  |                            |                                 |
| Тема 2. Информационные технологии                                     | 8                         | 6                                        | 4                                  | 2             | 2                             | 2                                  |                            |                                 |
| Тема 3. Информационная безопасность                                   | 3                         | 2                                        | 0                                  | 2             | 1                             | 0                                  |                            |                                 |
| <i>Раздел 2. Дискретная математика в программировании</i>             | 10                        | 6                                        | 2                                  | 4             | 4                             | 2                                  |                            |                                 |
| Тема 1. Системы счисления                                             | 2                         | 1                                        | 0                                  | 1             | 1                             | 0                                  |                            |                                 |
| Тема 2. Кодирование                                                   | 3                         | 2                                        | 1                                  | 1             | 1                             | 1                                  |                            |                                 |
| Тема 3. Математическая логика                                         | 3                         | 2                                        | 1                                  | 1             | 1                             | 0                                  |                            |                                 |
| Тема 4. Теория графов                                                 | 2                         | 1                                        | 0                                  | 1             | 1                             | 1                                  |                            |                                 |
| <i>Раздел 3. Введение в программирование</i>                          | 4                         | 2                                        | 1                                  | 1             | 2                             | 2                                  |                            |                                 |

|                                                                                           |            |           |           |           |           |           |  |          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|--|----------|
| Тема 1. Языки программирования, используемые для решения прикладных задач химии           | 4          | 2         | 1         | 1         | 2         | 2         |  |          |
| <i>Раздел 4. Прикладное программирование (на примере языка Fortran)</i>                   | 20         | 14        | 10        | 4         | 6         | 2         |  |          |
| Тема 1. Основные логические функции                                                       | 7          | 5         | 3         | 2         | 2         | 0         |  |          |
| Тема 2. Алгоритмы построения вычислительных модулей. Прикладные задачи                    | 13         | 9         | 7         | 2         | 4         | 2         |  |          |
| <i>Раздел 5. Прикладное программирование (на примере языка Python)</i>                    | 22         | 14        | 10        | 4         | 8         | 2         |  |          |
| Тема 1. Основные логические функции                                                       | 9          | 5         | 3         | 2         | 4         | 0         |  |          |
| Тема 2. Алгоритмы построения вычислительных модулей. Прикладные задачи                    | 13         | 9         | 7         | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Промежуточная аттестация в формате задания                                                | 2          |           |           |           |           | 2         |  | 2        |
| <b>Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии»</b>                              | <b>110</b> | <b>62</b> | <b>32</b> | <b>30</b> | <b>44</b> | <b>12</b> |  | <b>4</b> |
| <i>Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии</i>                     | 38         | 28        | 16        | 12        | 8         | 0         |  | 2        |
| Тема 1. Основы теории вероятностей: события, случайные величины, нормальное распределение | 6          | 4         | 2         | 2         | 2         | 0         |  |          |

|                                                                                        |    |    |    |    |    |    |  |   |
|----------------------------------------------------------------------------------------|----|----|----|----|----|----|--|---|
| Тема 2. Описательная статистика и визуализация данных                                  | 6  | 6  | 4  | 2  | 1  | 0  |  |   |
| Тема 3. Оценка параметров распределений: точечные и интервальные оценки                | 5  | 4  | 2  | 2  | 1  | 0  |  |   |
| Тема 4. Проверка статистических гипотез                                                | 5  | 4  | 2  | 2  | 1  | 0  |  |   |
| Тема 5. Дисперсионный анализ (ANOVA)                                                   | 6  | 5  | 3  | 2  | 1  | 0  |  |   |
| Тема 6. Корреляционный и регрессионный анализ                                          | 8  | 6  | 4  | 2  | 2  | 0  |  |   |
| <i>Раздел 2. Базы данных и программные продукты</i>                                    | 55 | 23 | 13 | 10 | 30 | 22 |  | 2 |
| Тема 1. Базы данных в химии                                                            | 8  | 6  | 4  | 2  | 2  | 0  |  |   |
| Тема 2. Математические программные продукты                                            | 10 | 8  | 8  | 0  | 2  | 0  |  |   |
| Тема 3. ИИ в химии и в научных исследованиях                                           | 37 | 9  | 1  | 8  | 26 | 22 |  | 2 |
| <i>Раздел 3. Моделирование структуры веществ и материалов в программе USPEX</i>        | 6  | 2  | 2  | 0  | 4  | 0  |  |   |
| Тема 1. Программа USPEX для предсказания кристаллических структур веществ и материалов | 6  | 2  | 2  | 0  | 4  | 0  |  |   |
| <i>Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул</i>                     | 10 | 8  | 0  | 8  | 2  | 0  |  |   |
| Тема 1. Принципы и стратегии молекулярного дизайна                                     | 2  | 2  | 0  | 2  | 0  | 0  |  |   |

|                                                                                                                 |           |           |           |           |           |           |  |          |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|--|----------|
| Тема 2. ADMET-моделирование и прогноз токсичности in silico                                                     | 3         | 2         | 0         | 2         | 1         | 0         |  |          |
| Тема 3. Современные вычислительные подходы к моделированию растворимости и липофильности                        | 2         | 2         | 0         | 2         | 0         | 0         |  |          |
| Тема 4. Интегративные стратегии в молекулярном дизайне: от виртуального скрининга к созданию соединений-лидеров | 3         | 2         | 0         | 2         | 1         | 0         |  |          |
| <b>Модуль 3 Компьютерный дизайн в открытии лекарств</b>                                                         | <b>70</b> | <b>36</b> | <b>16</b> | <b>20</b> | <b>30</b> | <b>20</b> |  | <b>4</b> |
| Тема 1. Молекулярные дескрипторы                                                                                | 8         | 4         | 2         | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Тема 2. QSAR анализ                                                                                             | 8         | 4         | 2         | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Тема 3. Молекулярный докинг                                                                                     | 6         | 2         |           | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Тема 4. Основы работы в среде Maestro Shrodinger                                                                | 8         | 4         | 2         | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Тема 5. Алгоритм Glide                                                                                          | 6         | 4         | 2         | 2         | 2         | 2         |  |          |
| Тема 6. Алгоритм ComFA                                                                                          | 6         | 4         | 2         | 2         | 2         | 2         |  |          |
| Промежуточная аттестация в формате задания                                                                      | 2         |           |           |           |           | 2         |  | 2        |
| Тема 7. Алгоритм LigandPrep                                                                                     | 6         | 2         |           | 2         | 4         | 2         |  |          |
| Тема 8. Автоматизация виртуального скрининга                                                                    | 6         | 4         | 2         | 2         | 2         | 2         |  |          |
| Тема 9. Дизайн библиотек химических соединений                                                                  | 6         | 4         | 2         | 2         | 2         | 2         |  |          |
| Тема 10. Работа с алгоритмом AlphaFold                                                                          | 8         | 4         | 2         | 2         | 2         | 2         |  |          |

|                                            |            |          |          |  |  |          |           |   |
|--------------------------------------------|------------|----------|----------|--|--|----------|-----------|---|
| Промежуточная аттестация в формате задания | 2          |          |          |  |  | 2        |           | 2 |
| <b>Практика/стажировка</b>                 | <b>24</b>  |          |          |  |  |          | <b>24</b> |   |
| <b>Итоговая аттестация</b>                 | <b>10</b>  | <b>2</b> | <b>2</b> |  |  | <b>8</b> |           |   |
| <b>Итого</b>                               | <b>286</b> |          |          |  |  |          |           |   |

Общая трудоемкость по программе:

| Программа                                          | Общая трудоемкость, часов | Обязательная контактная учебная нагрузка |                                    |               | Самостоятельная работа, часов |                                    | Практики стажировки, часов | Промежуточная аттестация, в т.ч. в формате практического задания, часов | Итоговая аттестация, часов |
|----------------------------------------------------|---------------------------|------------------------------------------|------------------------------------|---------------|-------------------------------|------------------------------------|----------------------------|-------------------------------------------------------------------------|----------------------------|
|                                                    |                           | всего, часов                             | в т.ч. практические занятия, часов | лекции, часов | всего, часов                  | в т.ч. практические задания, часов |                            |                                                                         |                            |
| <b>Цифровое моделирование химических процессов</b> | <b>286</b>                | <b>144</b>                               | <b>76</b>                          | <b>68</b>     | <b>98</b>                     | <b>52</b>                          | <b>24</b>                  | <b>10</b>                                                               | <b>10</b>                  |

Практические занятия (практическая работа в аудитории, практика, практические задания в рамках самостоятельной работы) составляют 56 % (160 ч.) от общего объема ДПП ПП.

— — —

| <b>Структурные элементы (разделы Программы)<sup>24</sup> и этапы оценки компетенций</b> | <b>Недели</b> |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|---------------|--------------|--------------|--------------|-----------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
|                                                                                         | <b>1-9</b>    | <b>10-19</b> | <b>20-29</b> | <b>30-35</b> | <b>36</b> |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Модуль 1 «Алгоритмизации и языки программирования»</b>                               |               |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Модуль 2 «Вычислительные методы в химии»</b>                                         |               |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Модуль 3 «Компьютерный дизайн в открытии лекарств»</b>                               |               |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Стажировка</b>                                                                       |               |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>Итоговая аттестация</b>                                                              |               |              |              |              |           |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

[illegible]

#### IV. Рабочие программы модулей

##### **Модуль 1. Алгоритмизации и языки программирования**

Алгоритм – описанная на некотором языке точная конечная система правил, определяющая содержание и порядок действий над некоторыми объектами, строгое выполнение которых дает решение поставленной задачи. Понятие алгоритма, являющееся фундаментальным в математике и информатике, возникло задолго до появления средств вычислительной техники. Любой алгоритм существует не сам по себе, а предназначен для определенного исполнителя (человека, робота, компьютера, языка программирования и т.д.). Свойством, характеризующим любого исполнителя, является то, что он умеет выполнять некоторые команды.

Алгоритмизация - это процесс построения алгоритма решения задачи, результатом которого является выделение этапов процесса обработки данных, формальная запись содержания этих этапов и определение порядка их выполнения.

Модуль направлен на формирование у слушателей компетенции в области алгоритмизации и средств программной разработки.

##### **1. Область применения рабочей программы Модуля 1.**

Рабочая программа Модуля 1. Алгоритмизация и языки программирования (далее – рабочая программа) является частью дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки ИТ-профиля «Цифровое моделирование химических процессов» и направлена на формирование у слушателей компетенций в области образования и науки: ID 28, ID 30.

##### **2. Структура и краткое содержание рабочей программы**

| № п / п | Наименование тем, виды учебной работы и краткое содержание учебного материала                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Объем, часов |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 1.      | <b>Тема 1.1 Цифровые устройства, предназначенные для работы с информацией</b><br><b>Лекция 1.</b> Классификация цифровых устройств. Принцип программного управления. Архитектура: устройство, программное обеспечение. Аппаратная и программная платформы. Сети передачи информации. Хранение информации<br><b>Тема 1.2. Информационные технологии</b><br><b>Лекция 2.</b> Классификация цифровых сервисов. Алгоритмизация деятельности пользователя.<br><b>Тема 1.3. Информационная безопасность</b><br><b>Лекция 3.</b> Основы защиты информации.<br><br><b>Практическое занятие 1.</b> Офисные приложения: от локального устройства до облачного взаимодействия. Организация совместной работы. Работа с мультимедийной информацией.<br><br><b>Самостоятельная работа.</b> Элементы интернет- технологий. Информационно-поисковые и справочные системы. Работа с ментальными картами. Решение тестовых заданий | 14           |
| 2       | <b>Раздел 2. Дискретная математика в программировании</b><br><b>Тема 2.1. Системы счисления</b><br><b>Лекция 1.</b> Позиционные системы счисления.<br><b>Тема 2.2. Кодирование</b><br><b>Лекция 2.</b> Двоичное представление информации в памяти компьютера.<br><b>Тема 2.3. Математическая логика</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 10           |

|   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |    |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
|   | <p>Лекция 3. Основные понятия булевой алгебры.<br/> <b>Тема 2.4. Теория графов</b><br/> Лекция 4. Графы: определение, формы представления, классы задач на графах.</p> <p><b>Практическое занятие 1.</b> Кодирование символьной информации.<br/> <b>Практическое занятие 2.</b> Базовые булевы операции. Таблицы истинности.</p> <p><b>Самостоятельная работа.</b> Перевод из двоичной системы счисления в шестнадцатеричную и обратно, Таблицы кодировок, Упрощение логических выражений, Использование приложения <a href="https://graphonline.ru">https://graphonline.ru</a> для визуализации графов. Решение тестовых заданий.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |    |
| 3 | <p><b>Раздел 3. Введение в программирование</b><br/> <b>Тема 1.</b> Языки программирования, используемые для решения прикладных задач химии</p> <p><b>Лекция 1.</b> Работа с данными в программе. Базовые типы данных, основные операторы алгоритмического языка. Рекуррентные последовательности<br/> <b>Практическое занятие 1.</b> Составление простых алгоритмов и программ. Декомпозиция решения задачи. Оформление программ с функциями</p> <p><b>Самостоятельная работа.</b> Просмотр видеолекций. Составление простых алгоритмов и программ. Решение тестовых заданий</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 4  |
| 4 | <p><b>Раздел 4. Прикладное программирование (на примере языка Fortran)</b><br/> <b>Тема 1.</b> Основные логические функции<br/> <b>Лекция 1.</b> Общие данные языка, описание. Принципы работы. Прикладные задачи. Логические функции языка, процедуры, библиотеки, решаемые задачи.<br/> Построение матриц и решение систем дифференциальных уравнений.</p> <p><b>Практическое занятие 1.</b> Построение простейших логических функций, решение систем уравнений, матрицы, решение дифференциальных уравнений</p> <p><b>Тема 2.</b> Алгоритмы построения вычислительных модулей. Прикладные задачи<br/> <b>Лекция 2.</b> Общий алгоритм вычислительных модулей, блоки констант и вариативных переменных, свободные переменные (задание пользователем). Графический интерфейс<br/> <b>Практическое занятие 2.</b> Создание простейших вычислительных модулей<br/> Создание алгоритмов вычисления систем кинетических уравнений, создание графического интерфейса с вводом переменных</p> <p>Самостоятельная работа: Просмотр видеолекций. Анализ материалов лекции, литературы, выполнение ИДЗ. Решение тестовых заданий</p> | 20 |
| 5 | <p><b>Раздел 5. Прикладное программирование (на примере языка Python)</b><br/> <b>Тема 1.</b> Основные логические функции<br/> <b>Лекция 1.</b> Общие данные языка, описание. Принципы работы. Прикладные задачи. Логические функции языка, процедуры, библиотеки, решаемые задачи.<br/> Построение матриц и решение систем дифференциальных уравнений.<br/> <b>Практическое занятие 1.</b> Составление простых алгоритмов и программ.</p> <p><b>Тема 2.</b> Алгоритмы построения вычислительных модулей. Прикладные задачи<br/> <b>Лекция 2.</b> Понятие вспомогательных алгоритмов: процедуры и функции. Рекурсивные функции: алгоритмы перебора с возвратом.<br/> Встроенные функции и стандартные библиотеки алгоритмического языка (string, matplotlib, re, sort для Python). Алгоритм поиска элемента в</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 22 |

|   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |    |
|---|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
|   | <p>неупорядоченной последовательности данных.</p> <p><b>Практическое занятие 2.</b> Решение задач с использованием библиотечных функций.</p> <p>Декомпозиция решения задачи. Оформление программ с функциями.</p> <p>Реализация алгоритма поиска в последовательности слов. Построение простейших логических функций, решение систем уравнений, матрицы, решение дифференциальных уравнений. Создание алгоритмов вычисления систем кинетических уравнений, создание графического интерфейса с вводом переменных.</p> <p>Самостоятельная работа: Просмотр видеолекций. Оформление программ с функциями. Составление простых алгоритмов и программ. Отладка и тестирование программ. Решение тестовых заданий</p> |    |
| 5 | Промежуточная аттестация в формате задания                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 2  |
| 6 | Итого                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 72 |

### 3. Учебно-тематический план рабочей программы

| №<br>п<br>/<br>п | Наименование и краткое содержание структурного элемента (раздела) Программы | Количество часов |                      |                        |                      |
|------------------|-----------------------------------------------------------------------------|------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
|                  |                                                                             | аудиторных       |                      | самостоятельной работы |                      |
|                  |                                                                             | всего, часов     | практические занятия | всего, часов           | практические задания |
| 1.               | Раздел 1. Цифровая культура                                                 | 10               | 4                    | 4                      | 2                    |
| 2.               | Раздел 2. Дискретная математика в программировании                          | 6                | 2                    | 4                      | 2                    |
| 3.               | Раздел 3. Введение в программирование                                       | 2                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 4.               | Раздел 4. Прикладное программирование (на примере языка Fortran)            | 14               | 10                   | 6                      | 2                    |
| 5.               | Раздел 5. Прикладное программирование (на примере языка Python)             | 14               | 10                   | 8                      | 2                    |
| 5.               | Промежуточная аттестация                                                    | 2                |                      |                        |                      |
| 6.               | Итого                                                                       | 72               |                      |                        |                      |

### 4. Контроль и оценка результатов освоения рабочей программы

Образовательная организация высшего образования, реализующая рабочую программу, обеспечивает организацию и проведение текущего и промежуточного контроля демонстрируемых обучающимися образовательных результатов.

Текущий контроль проводится преподавателем на основе оценивания результатов практических работ и самостоятельной работы обучающихся. Промежуточный контроль проводится в форме тестирования и заданий. Формы и методы текущего и промежуточного контроля, критерии оценивания доводятся до сведения обучающихся в начале обучения.

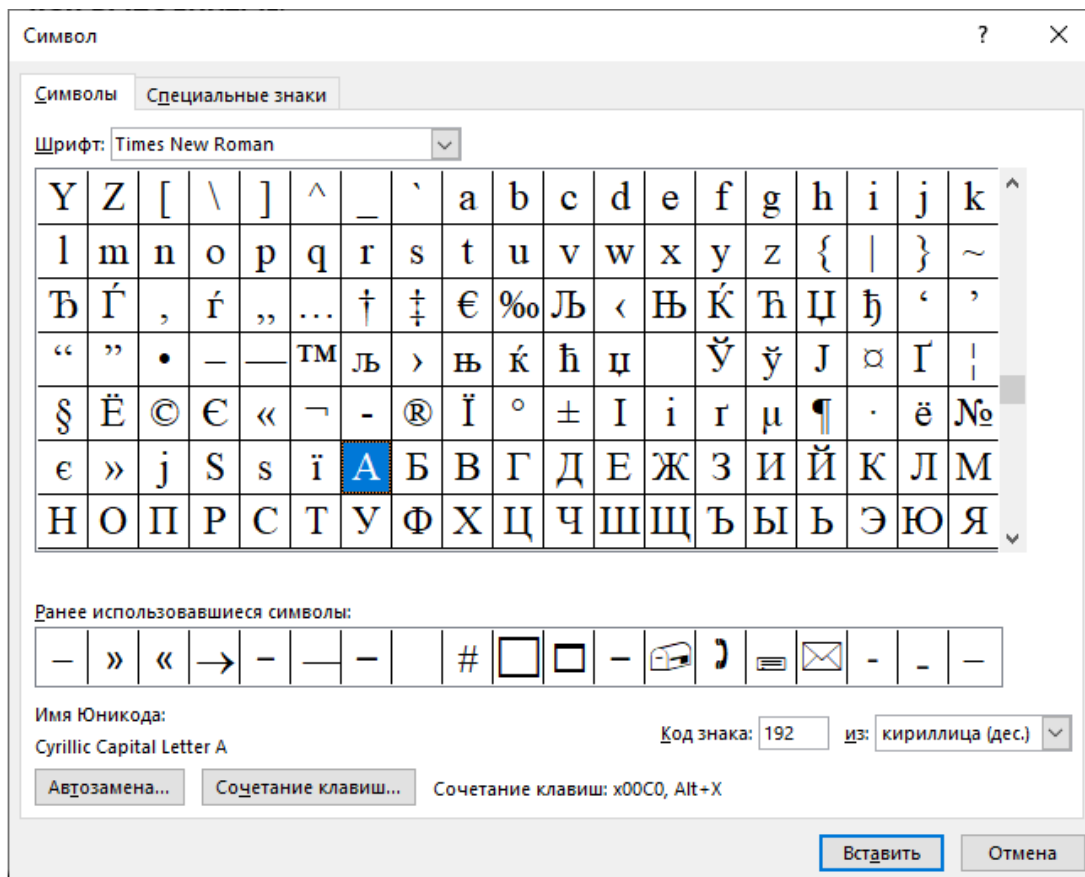
### 5. Примеры оценочных средств

Слушателю необходимо выполнить верно не менее 60% тестовых заданий, а также не менее 60% от практических заданий. Тесты проверяются автоматически, задания проверяют тьюторы программы.

— • —

**Задание 2.** В текстовом редакторе Word определить числовые коды нескольких символов: (в кодировке CP1251).

1. Запустить текстовый процессор Word.
2. Ввести команду [Вставка-Символ-Другие символы...]. На экране появится диалоговое окно Символ. Центральную часть диалоговой панели занимает таблица символов.



3. В этом окне выполните последовательность действий:
- Установить шрифт, имеющий кириллицу (например, Times New Roman, на рисунке обозначено 1);
  - Выбрать кодировку CP1251 (2);
  - Выбрать символ (например, прописную букву «А», обозначено.3).
4. В текстовом поле Код знака: появится десятичный числовой код символа (в данном случае 192).

Таблицы кодирования (с 128 кода, национальная составляющая)

## Кодовая таблица Windows -1251

Кодировка Windows 1251

|      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Á    | à   | ,   | è   | „   | …   | †   | ‡   | €   | %   | É   | <   | й   | Й   | ó   | ú   |
| 128  | 129 | 130 | 131 | 132 | 133 | 134 | 135 | 136 | 137 | 138 | 139 | 140 | 141 | 142 | 143 |
| á    | ‘   | ’   | “   | ”   | •   | —   | —   | €   | ™   | é   | >   | ò   | í   | ó   | ý   |
| 144  | 145 | 146 | 147 | 148 | 149 | 150 | 151 | 152 | 153 | 154 | 155 | 156 | 157 | 158 | 159 |
| nbsp | ÿ   | Ы   | Э   | и   | ы   | І   | Ѕ   | Ё   | ©   | Ю   | «   | ¬   | shy | ®   | ђ   |
| 160  | 161 | 162 | 163 | 164 | 165 | 166 | 167 | 168 | 169 | 170 | 171 | 172 | 173 | 174 | 175 |
| •    | ±   | Ы   | Э   | ’   | µ   | ¶   | •   | ё   | №   | ю   | »   | з   | ю   | я   | я   |
| 176  | 177 | 178 | 179 | 180 | 181 | 182 | 183 | 184 | 185 | 186 | 187 | 188 | 189 | 190 | 191 |
| А    | Б   | В   | Г   | Д   | Е   | Ж   | З   | И   | Й   | К   | Л   | М   | Н   | О   | П   |
| 192  | 193 | 194 | 195 | 196 | 197 | 198 | 199 | 200 | 201 | 202 | 203 | 204 | 205 | 206 | 207 |
| Р    | С   | Т   | У   | Ф   | Х   | Ц   | Ч   | Ш   | Щ   | Ъ   | Ы   | Ь   | Э   | Ю   | Я   |
| 208  | 209 | 210 | 211 | 212 | 213 | 214 | 215 | 216 | 217 | 218 | 219 | 220 | 221 | 222 | 223 |
| а    | б   | в   | г   | д   | е   | ж   | з   | и   | й   | к   | л   | м   | н   | о   | п   |
| 224  | 225 | 226 | 227 | 228 | 229 | 230 | 231 | 232 | 233 | 234 | 235 | 236 | 237 | 238 | 239 |
| р    | с   | т   | у   | ф   | х   | ц   | ч   | ш   | щ   | ъ   | ы   | ь   | э   | ю   | я   |
| 240  | 241 | 242 | 243 | 244 | 245 | 246 | 247 | 248 | 249 | 250 | 251 | 252 | 253 | 254 | 255 |

## Кодовая таблица KOI-8

|     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |     |     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|
| —   | І   | Г   | г   | Л   | л   | Т   | т   | Т   | т   | Т    | т   | ■   | ■   | ■   | ■   |
| 128 | 129 | 130 | 131 | 132 | 133 | 134 | 135 | 136 | 137 | 138  | 139 | 140 | 141 | 142 | 143 |
| ▒   | ▒   | ▒   | г   | ■   | •   | √   | ≈   | ≤   | ≥   | nbsp | Ј   | •   | 2   | •   | ÷   |
| 144 | 145 | 146 | 147 | 148 | 149 | 150 | 151 | 152 | 153 | 154  | 155 | 156 | 157 | 158 | 159 |
| =   |     | ƒ   | ё   | π   | π   | π   | π   | π   | π   | π    | π   | π   | π   | π   | π   |
| 160 | 161 | 162 | 163 | 164 | 165 | 166 | 167 | 168 | 169 | 170  | 171 | 172 | 173 | 174 | 175 |
|     |     |     | Е   |     |     | т   | π   | т   | т   | т    | т   | т   | т   | т   | т   |
| 176 | 177 | 178 | 179 | 180 | 181 | 182 | 183 | 184 | 185 | 186  | 187 | 188 | 189 | 190 | 191 |
| Ю   | а   | б   | ц   | д   | е   | ф   | г   | х   | и   | й    | к   | л   | м   | н   | о   |
| 192 | 193 | 194 | 195 | 196 | 197 | 198 | 199 | 200 | 201 | 202  | 203 | 204 | 205 | 206 | 207 |
| п   | я   | р   | с   | т   | у   | ж   | в   | ь   | ы   | з    | ш   | э   | щ   | ч   | ъ   |
| 208 | 209 | 210 | 211 | 212 | 213 | 214 | 215 | 216 | 217 | 218  | 219 | 220 | 221 | 222 | 223 |
| Ю   | А   | Б   | Ц   | Д   | Е   | Ф   | Г   | Х   | И   | Й    | К   | Л   | М   | Н   | О   |
| 224 | 225 | 226 | 227 | 228 | 229 | 230 | 231 | 232 | 233 | 234  | 235 | 236 | 237 | 238 | 239 |
| П   | Я   | Р   | С   | Т   | У   | Ж   | В   | Ь   | Ы   | З    | Ш   | Э   | Щ   | Ч   | Ъ   |
| 240 | 241 | 242 | 243 | 244 | 245 | 246 | 247 | 248 | 249 | 250  | 251 | 252 | 253 | 254 | 255 |

Кодировка KOI-8

Задание 3. Записать такие значения переменных a,b,c,d, чтобы значение функции  $f = a \wedge b \wedge \neg c \wedge \neg d$  было 1

Задание 4. Записать текст ALPHA в закодированном виде кодом ASCII (каждый символ в 16-ричном виде)

Задание 5. Реализовать функцию, которая строит словарь частот символов в заданной строке. Реализовать программу, которая вводит строку и вызывает данную функцию. Проверить работу программы на строках разной длины.

Исходные данные: строка символов (лучше всего, латинских букв)

Результат: словарь, содержащий пары «символ: частота».

## Примеры практических заданий

1. Преобразовать черновик документа в документ с заданной структурой, используя средства автоматизации в приложении.
2. Организовать совместную работу пользователей с документом.
3. На основе черновика таблицы сформировать отчет, используя автоматизацию статистической обработки данных, и выполнить визуализацию средствами приложения.

4. Создать коллаж из 2-3 изображений.
5. Оформить предоставленные материалы в формате 2-3 взаимосвязанных гипертекстовых страниц с внутренними и внешними ссылками.
6. Найти коды заданных символов в разных таблицах кодировок.
7. Упростить заданное логическое выражение.
8. Составить алгоритм, написать, отладить и протестировать программу решения задачи, не использующей последовательности данных.
9. Решить задачу упорядочения последовательности слов по алфавиту.
10. Написать программу рисования несложного изображения.

### **Задания для самостоятельной работы**

1. Использование ментальных карт для структурирования информации, создание ментальной карты, описывающей современные устройства для работы с информацией.
2. Создание коллажа из 2-3 изображений.
3. Оформление предоставленных материалов разных форматов в виде 2-3 взаимосвязанных гипертекстовых страниц с внутренними и внешними ссылками.
4. Отладка и тестирование простых программ на алгоритмическом языке.
5. Отладка и тестирование программ с функциями.
6. Отладка и тестирование программы упорядочения последовательности слов.

### **Методическое обеспечение включает в себя:**

- Дополнительная профессиональная программа профессиональной переподготовки
- Материалы лекций
- Материалы практических занятий
- Информационные ресурсы сети «Интернет»
- Методические рекомендации и указания
- Фонды оценочных средств
- Список нормативных документов, основной и рекомендуемой литературы.

Для проведения учебных занятий, промежуточной и итоговой аттестации в режиме видеоконференцсвязи (вебинара) используется специализированная информационная система видеоконференцсвязи Яндекс Телемост. Для проведения прочих дистанционных мероприятий (форумы, чаты, прием и проверка результатов практических работ, тестирование, дистанционные консультации и т.д.), а также предоставления доступа слушателей к электронным информационным ресурсам и электронным образовательным ресурсам используется специализированная информационная система дистанционного обучения Moodle.

Преподавателям и слушателям предоставляется авторизованный доступ к информационным системам.

Контроль соблюдения условий проведения мероприятий, в рамках которых осуществляется оценка результатов обучения, обеспечивается специалистами центра электронного обучения, а также автоматически с помощью функционала СДО (lms.kantiana.ru).

Организация учебных занятий, проводимых в режиме видеоконференций (вебинаров), осуществляется специалистами центра электронного обучения и включает:

- информирование слушателей о технических требованиях к оборудованию и каналам связи;
- предварительную проверку связи со слушателями;
- создание и настройку вебинара в информационной системе видеоконференцсвязи;
- предоставление преподавателям и слушателям гиперссылки на URL-адрес (адрес ресурса в сети Интернет) вебинара;
- предоставление (при необходимости) рабочего места преподавателю, контроль состояния вебинара в процессе его проведения;
- запись вебинара;
- видеомонтаж вебинара (при необходимости);
- предоставление слушателям доступа к записи вебинара.

### **6. Кадровое обеспечение образовательного процесса**

| ФИО, должность                                                                                                                                          | Модули (темы, лекции)                                                                                                                             |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Фукс Ирина Львовна, ведущий программист отдела информационного обеспечения Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                     | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 1 «Цифровая культура»                                                                |
| Трофимова Светлана Федоровна, ведущий программист отдела информационного обеспечения Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ           | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 2 «Дискретная математика в программировании», Раздел 3 «Введение в программирование» |
| Литовченко Марина Игоревна, ассистент кафедры программной инженерии Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ                            | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 4 «Алгоритмизация. Базовые понятия программирования (на примере языка Fortran)»      |
| Буркатовская Юлия Борисовна, доцент кафедры системного анализа и математического моделирования Института прикладной математики и компьютерных наук, ТГУ | Модуль 1. «Основы алгоритмизации и программирования», Раздел 5. Прикладное программирование (на примере языка Python)                             |

### **7. Материально-техническое обеспечение реализации рабочей программы**

Лекционные и практические занятия по модулю проводятся с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий на образовательной платформе [lms.kantiana.ru](https://lms.kantiana.ru) и посредством системы видеоконференцсвязи Яндекс Телемост.

| Вид занятий                  | Наименование оборудования                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лекции, практические занятия | Компьютер с подключением к сети Интернет.<br>Рекомендуемая конфигурация компьютера:<br>операционная система Windows 8 или выше.<br>разрешение экрана от 1280x1024;<br>процессор Intel i3 восьмого поколения или более новый;<br>1 Гб оперативной памяти или выше;<br>4 Гб свободного дискового пространства;<br>Также требуются наушники (динамики) для прослушивания видеолекций, микрофон для практических занятий. |

#### **Перечень необходимого программного обеспечения:**

- современный веб-браузер актуальной версии (Firefox 80, Google Chrome 85, Opera 70 или более новый)
- Python 3.10 или выше
- Пакеты NumPy, Pandas, matplotlib, Pillow, OpenCV

### **8. Информационное обеспечение реализации рабочей программы**

С целью поддержки и курирования слушателей, создается канал и чат в мессенджере MAX. В канале и чате присутствуют: менеджер программы, кураторы и тьюторы – специалисты-практики, готовые помочь углубиться в отрасль. В электронном курсе на [lms.kantiana.ru](https://lms.kantiana.ru) реализована система комментариев, форма и отзывов.

### **Литература**

#### **Основная литература**

1. Lecture Slides and Code / Introduction to Computer Science and Programming in Python / Electrical Engineering and Computer Science / MIT OpenCourseWare – 2016 – URL:

https://ocw.mit.edu/courses/6-0001-introduction-to-computer-science-and-programming-in-python-fall-2016/pages/lecture-slides-code/

2. Костюк Ю. Л. Основы разработки алгоритмов : учебное пособие / Ю. Л. Костюк, И. Л. Фукс // Элективный курс. Информатика – Москва : Бином. Лаб. знаний, 2010. – 286 с.

### **Дополнительная литература**

1. Мартелли А, Рейвенскрофт А., Холден С. Python. Справочник : полное описание языка. - СПб [и др.], Диалектика, 2019. - 892 с.

2. Бхаргава А. Грокаем алгоритмы. Иллюстрированное пособие для программистов и любопытствующих // Серия «Библиотека программиста» — СПб.: Питер, 2019. — 288 с.

## Модуль 2. Вычислительные методы в химии и технологиях

Модуль нацелен на получение слушателями базовых знаний относительно основных промышленных программных продуктов, используемых в химии и химической технологии, а также алгоритмов и методов создания вычислительных модулей для решения типовых задач. По результатам освоения модуля слушатели должны научиться разбираться в современных программных пакетах химической технологий, знать возможности основных промышленных программных пакетов, уметь выбирать требуемый программный пакет для выполнения задач химической промышленности.

Модуль направлен на формирование у слушателей компетенции в области создания расчетных моделей оптимальных молекул и химических реакций. Модуль построен по оригинальной схеме, заключающейся в поэтапном овладении базовыми знаниями в области компьютерных технологий и навыками работы с самыми современными программными средствами, а его структура отражает области применения вычислительных методов в современных химических исследованиях.

### 1. Область применения рабочей программы

Рабочая программа Модуля 2. Вычислительные методы в химии и технологии (далее – рабочая программа) является частью дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки ИТ-профиля «Цифровое моделирование химических процессов» и направлена на формирование у слушателей компетенций цифровой химии: ID 15, ID 28, ID 182

### 2. Структура и краткое содержание рабочей программы

| № п/п | Наименование тем, виды учебной работы и краткое содержание учебного материала                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Объем, часов |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 1.    | <p><i>Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологиях</i></p> <p><b>Тема 1. Основы теории вероятностей: события, случайные величины, нормальное распределение</b></p> <p><i>Лекции:</i> Пространство элементарных исходов. Классическое определение вероятности. Теоремы сложения и умножения вероятностей. Независимость событий. Понятие случайной величины. Математическое ожидание, дисперсия, среднее квадратическое отклонение. Нормальный закон распределения, правило «трёх сигм».</p> <p><i>Практические занятия:</i> Решение задач на вычисление вероятностей. Расчет математического ожидания и дисперсии. Работа с функциями нормального распределения в Python (scipy.stats.norm).</p> <p><i>Самостоятельная работа:</i> Решение задач на применение правил сложения и умножения вероятностей в контексте химической технологии. Расчет вероятности выхода параметра за пределы допуска.</p> <p><b>Тема 2. Описательная статистика и визуализация данных</b></p> <p><i>Лекции:</i> Генеральная совокупность и выборка. Репрезентативность выборки. Типы данных (количественные, качественные, порядковые). Выборочные характеристики: среднее арифметическое, медиана, мода, выборочная и исправленная дисперсия, среднее квадратическое отклонение, коэффициент вариации, размах, асимметрия, эксцесс. Эмпирическая функция распределения. Графические методы представления данных: гистограмма, полигон частот, ящик с усами (box-plot), Q-Q plot.</p> <p><i>Практические занятия:</i> Загрузка и первичный просмотр данных в среде Python (библиотеки pandas, numpy). Расчет основных описательных статистик. Построение гистограмм и box-plot с использованием matplotlib и seaborn. Построение Q-Q plot для визуальной оценки нормальности распределения. Анализ реальных химических данных (результаты измерений pH,</p> | 38           |

концентрации, температуры).

*Самостоятельная работа:* Построение гистограммы и эмпирической функции распределения для заданной выборки. Формулировка вывода о характере распределения и наличии выбросов.

### **Тема 3. Оценка параметров распределений: точечные и интервальные оценки**

*Лекции:* Точечные оценки. Понятие оценки неизвестного параметра распределения. Свойства точечных оценок: несмещенность, состоятельность, эффективность. Метод моментов: идея и применение для оценки математического ожидания и дисперсии. Метод максимального правдоподобия (ММП): основная идея. Примеры точечных оценок для параметров нормального распределения (среднее, дисперсия). Интервальные оценки. Понятие доверительного интервала. Доверительная вероятность (уровень доверия). Доверительный интервал для математического ожидания при известной дисперсии (нормальное распределение). Распределение Стьюдента (t-распределение): доверительный интервал для математического ожидания при неизвестной дисперсии. Влияние объема выборки и уровня значимости на ширину доверительного интервала.

*Практические занятия:* Расчет точечных оценок математического ожидания и дисперсии по выборке в Python (`numpy.mean`, `numpy.var`, `numpy.std`). Сравнение выборочной и исправленной дисперсии. Демонстрация свойства состоятельности на примере увеличения объема выборки. Расчет доверительных интервалов для среднего значения в Python (`scipy.stats.t.interval`). Анализ влияния объема выборки и уровня доверия на ширину доверительного интервала. Построение доверительных интервалов для реальных химических данных (например, доверительный интервал для средней концентрации примеси в партии продукта).

*Самостоятельная работа:* Расчет точечных оценок (среднее, дисперсия) для заданной выборки. Построение 90%, 95% и 99% доверительных интервалов для одних и тех же выборочных данных. Сравнение полученных интервалов и интерпретация различий.

### **Тема 4. Проверка статистических гипотез: t-критерий Стьюдента**

*Лекции:* Статистическая гипотеза. Нулевая и альтернативная гипотезы. Ошибки первого и второго рода. Уровень значимости  $\alpha$ . P-значение (p-value): определение и интерпретация. Проверка гипотезы о равенстве среднего заданному значению (одновыборочный t-тест). Проверка гипотезы о равенстве средних двух независимых выборок (двухвыборочный t-тест). Критерий Шапиро–Уилка для проверки нормальности распределения.

*Практические занятия:* Реализация t-тестов в Python (`scipy.stats.ttest_1samp`, `scipy.stats.ttest_ind`). Проверка нормальности распределения (`scipy.stats.shapiro`). Сравнение двух выборок (например, эффективность двух катализаторов, две партии сырья). Интерпретация p-value и формулировка статистического вывода.

*Самостоятельная работа:* Решение задачи на применение двухвыборочного t-теста для сравнения двух технологических режимов. Оформление вывода о наличии или отсутствии статистически значимых различий.

### **Тема 5. Дисперсионный анализ (ANOVA)**

*Лекции:* Ограничения t-теста при сравнении нескольких групп.

Однофакторный дисперсионный анализ (ANOVA): основная идея. Разложение общей дисперсии на межгрупповую и внутригрупповую составляющие. F-статистика и её распределение. Условия применимости ANOVA (нормальность распределения в группах, гомогенность дисперсий). Пост-хок анали. Двухфакторный ANOVA: оценка влияния двух факторов и их взаимодействия (обзорно).

*Практические занятия:* Проведение однофакторного ANOVA в Python (scipy.stats.f\_oneway, statsmodels). Применение пост-хок теста для определения того, какие именно группы различаются. Разбор практических кейсов: сравнение эффективности нескольких катализаторов, сравнение качества продукта из разных партий сырья, анализ влияния температуры на выход продукта (двухфакторный ANOVA — демонстрация).

*Самостоятельная работа:* Анализ данных трех и более выборок. Проведение ANOVA и пост-хок анализа. Формулировка вывода о том, какие группы статистически значимо различаются.

## **Тема 6. Корреляционный и регрессионный анализ: выявление связей и прогнозирование**

*Лекции:* Понятие зависимости между случайными величинами. Функциональная, статистическая и корреляционная зависимости. Коэффициент корреляции Пирсона (для нормально распределенных данных) и его свойства. Ранговый коэффициент корреляции Спирмена (для данных, не подчиняющихся нормальному закону). Корреляционная матрица. Отличие корреляции от причинно-следственной связи. Парная линейная регрессия: модель, задача оценки параметров. Метод наименьших квадратов (МНК). Коэффициент детерминации  $R^2$  как мера качества модели. Анализ остатков. Множественная регрессия (введение). Основы прогнозирования по регрессионной модели.

*Практические занятия:* Расчет коэффициентов корреляции Пирсона и Спирмена в Python (scipy.stats.pearsonr, scipy.stats.spearmanr). Построение корреляционной матрицы и её визуализация (seaborn.heatmap). Построение парной линейной регрессии с использованием sklearn.linear\_model.LinearRegression или statsmodels. Оценка качества модели по коэффициенту детерминации  $R^2$ .

Решение прикладной задачи: построение калибровочной кривой (зависимость сигнала прибора от концентрации вещества) и прогнозирование неизвестной концентрации с расчетом ошибки прогноза.

Введение в множественную регрессию: модель с двумя предикторами, интерпретация коэффициентов.

*Самостоятельная работа:* Построение регрессионной модели для зависимости температуры кипения от молекулярной массы (на датасете из Раздела 1). Оценка качества модели. Построение прогноза для нового соединения.

|    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |    |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2. | <p><b>Раздел 2. Базы данных и программные продукты</b></p> <p><b>Тема 1. Базы данных в химии</b></p> <p><i>Лекции.</i> Понятие базы данных и системы управления базами данных. Реляционные и нереляционные базы данных. Основные химические базы данных: PubChem, NIST Chemistry WebBook, SDBS, PDB, ICSD. Типы данных в химических БД: структурные формулы, физико-химические свойства, спектральные данные, термодинамические константы. Принципы поиска информации: по названию, формуле, молекулярной массе, структурному фрагменту. Экспорт данных.</p> <p><i>Практические занятия.</i> Работа с веб-интерфейсами PubChem и NIST Chemistry WebBook. Поиск соединений, изучение свойств и спектральных данных, экспорт в CSV. Извлечение данных с использованием PubChem API в среде Python: получение молекулярной массы, logP, температуры кипения для заданного перечня соединений. Сохранение результатов в DataFrame и экспорт в CSV.</p> <p><i>Самостоятельная работа:</i> Формирование датасета из 10 органических соединений заданного класса с использованием PubChem API. Подготовка CSV-файла для статистического анализа.</p> <p><b>Тема 2. Математические программные продукты</b></p> <p><i>Лекции.</i> Обзор математических программных продуктов. Разбор основных возможностей программ, целей и задач, решаемых при использовании инструментов.</p> <p><i>Практические занятия.</i> Практическое освоение Minitab. Базовые операции для работы с данными в Minitab. Первичная обработка экспериментальных данных в Minitab. Оценивание неизвестных параметров распределений методом максимального правдоподобия. Проверка параметрических гипотез в Minitab. Корреляционный анализ в Minitab. Проверка непараметрических гипотез в Minitab. Модель множественной линейной регрессии.</p> <p><i>Самостоятельная работа:</i> просмотр видео материалов.</p> <p><b>Тема 3. Искусственный интеллект в химии и научных исследованиях</b></p> <p>Лекция 1. Цифровая экономика и технологическое лидерство. Понятие цифровой экономики, ключевые тренды. Технологическое лидерство и его влияние на рынок труда. Изменение требований к профессиям. (1 ч)<br/>Практическое занятие. Знакомство с курсом. Обсуждение влияния СЦТ на профессии студентов. Обзор структуры курса, системы оценки. Q&amp;A.</p> <p>Лекция 2. Сквозные цифровые технологии (СЦТ). Обзор ключевых СЦТ: Искусственный интеллект (общее понятие), Большие данные, Интернет вещей (IoT), Технологии распределенных реестров (Блокчейн), Новые производственные технологии (3D-печать), Компьютерное зрение, Облачные вычисления. Принципы действия и примеры применения в различных отраслях.<br/>Самостоятельная работа:<br/>Задание 1: "Цифровой паспорт моей профессии" – исследование трендов и СЦТ для своей специальности, заполнение матрицы.</p> <p>Лекция 3. Введение в LLM и базовые тактики промтинга. Что такое LLM? Принципы работы, сравнение моделей. Знакомство с Google AI Studio. Базовые тактики промтинга (Zero-Shot, One-Shot, Few-Shot).<br/>Самостоятельная работа:<br/>Задание 2: "Тренировочный полигон" – отработка тактик Zero-Shot, One-Shot, Few-Shot.<br/>Задание 3: "Мастерская промтов: R-T-F" – применение структурированной</p> | 55 |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |  |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  | <p>формулы промптинга.</p> <p>Лекция 4. Ограничения ИИ и основы критического анализа.<br/> 7 ограничений ИИ (технологические, когнитивные, этические). Понятие "когнитивной атрофии", этические дилеммы (авторство, академическая честность, ответственность). (1 ч)<br/> Самостоятельная работа:<br/> Задание 4: "Стресс-тест для ИИ" – провокация и анализ ошибок LLM.<br/> Задание 5: "Мой кодекс ИИ" – написание рефлексивного эссе.</p> <p>Лекция 5. Методология декомпозиции профессиональных задач и "Экспертный промт".<br/> Подходы к анализу профессиональных задач и рабочих процессов.<br/> Декомпозиция компетенций на операции. Использование профстандартов и вакансий. "Экспертный промт" для анализа декомпозированных задач с помощью LLM. (1 ч)<br/> Самостоятельная работа:<br/> Задание 6: "Анатомия моей профессии".<br/> Задание 7: "ИИ-консультант: Генерация гипотез".<br/> Задание 8: "Проверка гипотезы: Эксперимент".</p> <p>Лекция 6. LLM в науке: от гипотезы до анализа литературы. Практическое применение LLM<br/> Задание 9: "Дизайн исследования".<br/> Задание 10: "ИИ-ассистент: Литературный обзор". (СРС - 4 ч)</p> <p>Лекция 7. LLM для анализа трендов и генерации идей в профессиональной сфере. Методы использования LLM для глубокого анализа трендов на стыке профессии и СЦТ<br/> Самостоятельная работа:<br/> Задание 11: "Стратегическое исследование..." (подготовка теоретической базы и генерация идей).</p> <p>Лекция 8. Продвинутое промпты для LLM: планирование, структурирование и визуализация.<br/> Расширенные техники промптинга для составления планов, структурирования сложных ответов<br/> Основная часть СРС для Задания 11: "Стратегическое исследование..." (глубокое исследование, синтез и оформление результатов, включая возможную HTML-визуализацию). Подготовка к итоговому заданию.</p> |  |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|

|   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |     |
|---|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3 | <p><i>Раздел 3. Моделирование структуры веществ и материалов в программе USPEX</i></p> <p><b>Тема 1.</b> Программа USPEX для предсказания кристаллических структур веществ и материалов</p> <p><b>Лекция 2.</b> Расшифровка кристаллических структур. Проект USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography). Назначение программной среды USPEX. Порядок работы в программной среде USPEX. Правила построения модели в программе USPEX. Инструменты визуализации результатов моделирования в среде USPEX</p> <p><b>Практическое занятие 2.</b> Моделирование структуры материалов в среде USPEX. Визуализация структуры с помощью программы VESTA. Работа с базами данных по материаловедению. The Materials Project. Работа с базами данных по материаловедению. OQMD-The Open Quantum Materials Database.</p> <p>Самостоятельная работа: анализ материалов лекции, просмотр видео</p> | 6   |
| 4 | <p><i>Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул</i></p> <p><b>Тема 1.</b> Биоактивные соединения: классы, структура и биомиметики</p> <p><b>Тема 2.</b> Физико-химические основы молекулярного распознавания</p> <p><b>Тема 3.</b> Введение в квантово-химическое моделирование биологически активных соединений</p> <p><b>Тема 4.</b> «Моделирование термодинамических и спектроскопических свойств биоактивных соединений»</p> <p>Самостоятельная работа: анализ материалов лекции, просмотр видео</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 10  |
|   | Итого                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 110 |

### 3. Учебно-тематический план рабочей программы

| №<br>п/п | Наименование и краткое содержание структурного элемента (раздела) Программы     | Количество часов |                      |                        |                      |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------|------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
|          |                                                                                 | аудиторных       |                      | самостоятельной работы |                      |
|          |                                                                                 | всего, часов     | практические занятия | всего, часов           | практические задания |
| 1.       | <i>Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии</i>           | 28               | 16                   | 8                      | 0                    |
| 2.       | <i>Раздел 2. Базы данных и программные продукты</i>                             | 23               | 13                   | 26                     | 22                   |
| 3.       | <i>Раздел 3. Моделирование структуры веществ и материалов в программе USPEX</i> | 2                | 2                    | 4                      | 0                    |
| 4.       | <i>Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул</i>              | 8                | 0                    | 2                      | 0                    |
| 5.       | Промежуточная аттестация                                                        | 4                |                      |                        |                      |
| 6.       | Итого                                                                           | 110              |                      |                        |                      |

### 4. Контроль и оценка результатов освоения рабочей программы

Образовательная организация высшего образования, реализующая рабочую программу, обеспечивает организацию и проведение текущего и промежуточного контроля демонстрируемых обучающимися образовательных результатов.

Текущий контроль проводится преподавателем на основе оценивания результатов практических работ и самостоятельной работы обучающихся. Промежуточный контроль проводится в форме тестирования и заданий. Формы и методы текущего и промежуточного контроля, критерии оценивания доводятся до сведения обучающихся в начале обучения.

### 5. Примеры оценочных средств

Слушателю необходимо выполнить верно не менее 60% тестовых заданий, а также не менее 60% от практических заданий. Тесты проверяются автоматически, задания проверяют тьюторы программы.

**Задание 1.** Разработать файл Excel, используя пошаговую инструкцию из презентации. Сравнить расчетные данные насыщенных паров спиртов C2-C5 с табличными значениями. Сделать вывод об адекватности регрессионной модели. Используя встроенный оптимизатор Excel, произвести расчет материального баланса сепаратора разделения спиртов C2-C5 при температурах 50, 75, 100, 125, 150 °C и давлениях 0,5, 1, 1,5 бар. Сделать вывод об адекватности модели. Решения прикрепить в расчетных файлах Excel и текстового документа Word.

**Задание 2.** Провести проверку непараметрических гипотез в Minitab

Построить корреляционные поля зависимости выхода продукта (или выделения водорода в реакции получения гидроксида неодима) от параметров процесса. Проанализировать наличие и вид зависимости. Рассчитать коэффициенты корреляции Пирсона и Спирмена. Отобразить полученные графики и результаты расчетов в отчете и сделать вывод о зависимости между переменными.

**Задание 3.** Провести проверку непараметрических гипотез в Minitab.

Построить корреляционные поля зависимости выхода продукта (или выделения водорода в реакции получения гидроксида неодима) от параметров процесса. Проанализировать наличие и вид зависимости. Рассчитать коэффициенты корреляции Пирсона и Спирмена. Отобразить полученные графики и результаты расчетов в отчете и сделать вывод о зависимости между переменными.

**Задание 4.** Работа с базами данных по материаловедению. OQMD- The Open Quantum Materials Database

Познакомиться онлайн базой по материаловедению OQMD. Зарегистрироваться и разобрать принцип работы в базе для поиска выбранного соединения. Описать полученные результаты.

**Задание 5.** Моделирование материалов в среде USPEX.

Познакомьтесь с программой USPEX и документацией к ней. Изучите отдельные компоненты программы для работы и моделирования. Смоделируйте выбранный материал.

**Задание 6.** "Дизайн исследования: От гипотезы к методу"

Содержание: Студент формулирует тему гипотетического научного исследования, связанного с цифровизацией своей [НазваниеСпециальности]. С помощью LLM генерирует 2-3 исследовательские гипотезы и для одной из них предлагает 2-3 релевантных метода исследования с обоснованием.

**Задание 7.** "ИИ-ассистент: Литературный обзор"

Содержание: Студент находит 3 научные статьи (PDF) по теме своего гипотетического исследования. Загружает их в Google AI Studio (если поддерживается) или копирует текст. Последовательно получает от LLM рефераты статей, а затем – синтетический обзор на основе этих рефератов.

**Задание 8.** Молекулярный дизайн биологически активных молекул

Если программа PASS предсказывает для соединения высокую вероятность проявления «CYP3A4 inhibition», о чем это говорит с точки зрения медицинской химии?

Какой инструмент вы выберете для первоначальной оценки, является ли новое, нигде не описанное соединение перспективным для дальнейшего углубленного изучения методами молекулярного моделирования, и почему?

**Методическое обеспечение включает в себя:**

- Дополнительная профессиональная программа профессиональной переподготовки
- Материалы лекций
- Материалы практических занятий
- Информационные ресурсы сети «Интернет»

- Методические рекомендации и указания
- Фонды оценочных средств
- Список нормативных документов, основной и рекомендуемой литературы.

Для проведения учебных занятий, промежуточной и итоговой аттестации в режиме видеоконференцсвязи (вебинара) используется специализированная информационная система видеоконференцсвязи Яндекс Телемост. Для проведения прочих дистанционных мероприятий (форумы, чаты, прием и проверка результатов практических работ, тестирование, дистанционные консультации и т.д.), а также предоставления доступа слушателей к электронным информационным ресурсам и электронным образовательным ресурсам используется специализированная информационная система дистанционного обучения Moodle.

Преподавателям и слушателям предоставляется авторизованный доступ к информационным системам.

Контроль соблюдения условий проведения мероприятий, в рамках которых осуществляется оценка результатов обучения, обеспечивается специалистами центра электронного обучения, а также автоматически с помощью функционала СДО (lms.kantiana.ru).

Организация учебных занятий, проводимых в режиме видеоконференций (вебинаров), осуществляется специалистами центра электронного обучения и включает:

- информирование слушателей о технических требованиях к оборудованию и каналам связи;
- предварительную проверку связи со слушателями;
- создание и настройку вебинара в информационной системе видеоконференцсвязи;
- предоставление преподавателям и слушателям гиперссылки на URL-адрес (адрес ресурса в сети Интернет) вебинара;
- предоставление (при необходимости) рабочего места преподавателю, контроль состояния вебинара в процессе его проведения;
- запись вебинара;
- видеомонтаж вебинара (при необходимости);
- предоставление слушателям доступа к записи вебинара.

## 6. Кадровое обеспечение образовательного процесса

| ФИО, должность                                                                                                                                                                                                                            | Модули (темы, лекции)                                                                                                           |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лещинская Мария Анатольевна, старший преподаватель кафедры математического анализа и теории функций, Механико-математический факультет, ТГУ                                                                                               | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии» Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии            |
| Пчелинцев Евгений Анатольевич, д-р физ.-мат. Наук, заведующий кафедрой математического анализа и теории функций, Механико-математический факультет, ТГУ                                                                                   | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии» Раздел 1. Статистическая обработка данных в химии и технологии            |
| Фещенко Артем Викторович, директор Центра технологического и исследовательского сопровождения (ЦТИС), начальник отдела разработки и коммерциализации цифровых решений ЦТИС Института дистанционного образования, ТГУ                      | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 2. Базы данных и программные продукты                             |
| Курзина Ирина Александровна, доктор химических наук, профессор, заведующая кафедрой природных соединений, фармацевтической и медицинской химии химического факультета, директор центра исследований в области материалов и технологий ТГУ | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 3. Моделирование структуры веществ и материалов в программе USPEX |
| Хлебников Андрей Иванович, доктор химических наук, профессор кафедры природных соединений, фармацевтической и медицинской химии ТГУ                                                                                                       | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул              |
| Оганов Артем Ромаевич, руководитель лаборатории дизайна материалов, Сколтех                                                                                                                                                               | Модуль 2 «Вычислительные методы в химии и технологии». Раздел 4. Молекулярный дизайн биологически активных молекул              |

## 7. Материально-техническое обеспечение реализации рабочей программы

Лекционные и практические занятия по модулю проводятся с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий на образовательной платформе lms.kantiana.ru и посредством системы видеоконференцсвязи Яндекс Телемост.

| Вид занятий                  | Наименование оборудования                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лекции, практические занятия | Компьютер с подключением к сети Интернет.<br>Рекомендуемая конфигурация компьютера:<br>операционная система Windows 8 или выше.<br>разрешение экрана от 1280x1024;<br>процессор Intel i3 восьмого поколения или более новый;<br>1 Гб оперативной памяти или выше;<br>4 Гб свободного дискового пространства;<br>Также требуются наушники (динамики) для прослушивания видеолекций,<br>микрофон для практических занятий. |

## 8. Информационное обеспечение реализации рабочей программы

С целью поддержки и курирования слушателей, создается канал и чат в мессенджере МАХ. В канале и чате присутствуют: менеджер программы, кураторы и тьюторы – специалисты-практики, готовые помочь углубиться в отрасль. В электронном курсе на lms.kantiana.ru реализована система комментариев, форма и отзывов.

### Основная литература

- Фатеев А. В. Вычислительные методы в химии: лабораторные работы: учебно-методическое пособие по курсу "Вычислительные методы в химии" для студентов химического факультета ТГУ / А. В. Фатеев, В. П. Тугульдурова. – Томск : Издательство Томского государственного университета, 2021. – 103 с.  
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/koha:000566952>
- Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов 3-е изд. / В.Г. Цирельсон. – М. : Издательство «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2014. – 495 с.  
<https://e-lanbook-com.ez.lib.tsu.ru/book/172254>
- Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. : учебник и практикум для вузов / А.И. Ермаков. – М. : Издательство Юрайт, 2020. – 585 с.  
<https://urait-ru.ez.lib.tsu.ru/book/kvantovaya-mehanika-i-kvantovaya-himiya-v-2-ch-chast-1-kvantovaya-mehanika-491725>  
<https://urait-ru.ez.lib.tsu.ru/book/kvantovaya-mehanika-i-kvantovaya-himiya-v-2-ch-chast-2-kvantovaya-himiya-491726>
- Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. – М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2011. – 218 с.  
<https://www.litres.ru/e-v-butyrskaya/komputernaya-himiya-osnovy-teorii-i-rabota-s-programmami-gaussian-i-gaussview/>
- Соловьев М.Е. Компьютерная химия / – М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2005. – 536 с.
- Ochterski J.W. Thermochemistry in Gaussian / J.W. Ochterski. – Gaussian, Inc., 2000. –19 p.  
<https://gaussian.com/thermo/>
- Официальная документация и руководства по работе с Google AI Studio (Gemini) – URL: <https://ai.google.dev/gemini-api/docs?hl=ru> (дата обращения: 08.06.2024).
- Гладков В.А., Ветцель Р.А. Промт-инжиниринг: искусство управления нейросетями. – М.: Эксмо, 2024. – 288 с. (Серия: Digital. Книги для работы и жизни).
- Цифровая экономика и сквозные цифровые технологии: современные вызовы и перспективы экономического, социального и культурного развития / Под ред. И. А. Бондаренко, А. Н. Полетайкина. – Самара: ООО НИЦ «ПНК», 2020. – 297 с.

## Дополнительная литература

- Полещук О.Х. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул: учебное пособие / О.Х. Полещук, Д.М. Кижнер. – Томск : Издательство ТПУ, 2006. – 146 с.
- Цышевский Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций : учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский. – Казань : Издательство КНИТУ, 2012. – 87 с.
- Кодекс этики в сфере искусственного интеллекта. – Москва: Альянс в сфере искусственного интеллекта, 2021. – URL: <https://a-ai.ru/wp-content/uploads/2021/10/CodeAI.pdf> (дата обращения: 08.06.2024).
- Мирон Ю. А. Нейросети ChatGPT и Midjourney дома и на работе. С легким доступом из России. – Литрес, 2023. – 95 с.
- Сурова, Н. Ю. Искусственный интеллект: монография / Н. Ю. Сурова, М. Е. Косов. — Москва : ЮНИТИ-ДАНА, 2021. — 408 с. — ISBN 978-5-238-03513-0.
- Сквозные технологии цифровой экономики: Учебное пособие / Под ред. А.В. Бабкина. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2022.
- Никитин Н. А. Применение жизненного цикла модели для оценки инвестиций в искусственный интеллект на примере больших языковых моделей // Финансы: теория и практика. – 2024. – Т. 28, № 1. – С. 130-147. DOI: 10.26794/2587-5671-2024-28-1-130-147.
- Субботина М. В. Искусственный интеллект и высшее образование — враги или союзники // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Социология. – 2024. – Т. 24, № 1. – С. 171-183. DOI: 10.22363/2313-2272-2024-24-1-171-183.
- Лукичёв П. М., Чекмарев О. П. Риски применения искусственного интеллекта в системе высшего образования // Вопросы инновационной экономики. – 2024. – Т. 14, № 2. – С. 463-482. – DOI 10.18334/vines.14.2.120731.
- Царапкина Ю. М., Анисимова А. В., Антонова В. А., Морозова В. Н., Миронов А. Г. Применение искусственного интеллекта в профессионально-педагогической деятельности как основа саморазвития педагога // Мир науки. Педагогика и психология. — 2024. — Т. 12, № 3. — URL: <https://mir-nauki.com/PDF/48PDMN324.pdf>.
- Шталь Б. К., Шредер Д., Родригес Р. Этика искусственного интеллекта: введение / Пер. с англ. // Экономическая социология. – 2024. – Т. 25, № 1. – С. 104–123. DOI: 10.17323/1726-3247-2024-1-104-123.

## Электронные ресурсы

- Официальный сайт Gaussian, Inc. <https://gaussian.com/>
- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
  - Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. and et al. Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
  - ACD/ChemSketch;
  - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
  - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
 

|                                                                                                                                               |            |               |            |     |   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|---------------|------------|-----|---|
| – Электронный                                                                                                                                 | каталог    | Научной       | библиотеки | ТГУ | – |
| <a href="http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&amp;theme=system">http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&amp;theme=system</a> |            |               |            |     |   |
| – Электронная                                                                                                                                 | библиотека | (репозиторий) | ТГУ        | –   |   |
| <a href="http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index">http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index</a>                           |            |               |            |     |   |
| – ЭБС Лань – <a href="http://e.lanbook.com/">http://e.lanbook.com/</a>                                                                        |            |               |            |     |   |
| – ЭБС Консультант студента – <a href="http://www.studentlibrary.ru/">http://www.studentlibrary.ru/</a>                                        |            |               |            |     |   |
| – Образовательная платформа Юрайт – <a href="https://urait.ru/">https://urait.ru/</a>                                                         |            |               |            |     |   |
| – ЭБС ZNANIUM.com – <a href="https://znanium.com/">https://znanium.com/</a>                                                                   |            |               |            |     |   |
| – ЭБС IPRbooks – <a href="http://www.iprbookshop.ru/">http://www.iprbookshop.ru/</a>                                                          |            |               |            |     |   |
| – Google AI Studio: <a href="https://aistudio.google.com/">https://aistudio.google.com/</a>                                                   |            |               |            |     |   |

– TAdviser. Сквозные технологии цифровой экономики. [Электронный ресурс].

URL: <https://www.tadviser.ru/index.php/>

в) профессиональные базы данных:

– <https://webbook.nist.gov/chemistry/> – стандартная справочная база данных NIST;

– [https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre\\_index.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi) – спектральная база данных органических соединений;

– <https://cccbdb.nist.gov/geom1x.asp> – база данных по рассчитанной квантово-химическими методами геометрии соединений;

– <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html> – база данных термических констант соединений.

### Модуль 3. Компьютерный дизайн в открытии лекарств

#### 1. Область применения рабочей программы

Рабочая программа Модуля 3. Компьютерный дизайн в открытии лекарств (далее – рабочая программа модуля 3) является частью дополнительной профессиональной программы профессиональной переподготовки ИТ-профиля «Цифровое моделирование химических процессов» и направлена на формирование цифровых компетенций ID15, ID37 (продвинутый уровень) в рамках образовательных результатов, указанных в разделе II.1.

Освоение рабочей программы модуля 3 является инвариантом для всех обучающихся по Программе.

#### 2. Структура и краткое содержание рабочей программы модуля 3

| № п/п | Наименование тем, виды учебной работы и краткое содержание учебного материала                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Объем, часов |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| 1.    | <b>Тема 1. Молекулярные дескрипторы</b><br>Видеолекция: Понятие молекулярного дескриптора. Классификация: конституционные, топологические, электронные, пространственные. Дескрипторы на основе SMILES. Обзор библиотеки RDKit.<br>Практическое занятие:<br>1. Установка RDKit, загрузка молекул из SDF.<br>2. Расчёт дескрипторов LogP, молекулярной массы, числа доноров/акцепторов водородных связей.<br>3. Сохранение результатов в Pandas DataFrame.<br>Самостоятельная работа: Расчёт дескрипторов для набора из 50 молекул из базы ChEMBL. | 8            |
| 2     | <b>Тема 2. QSAR анализ</b><br>Видеолекция: Принципы количественного соотношения структура-активность. Подготовка данных, разбиение на обучающую/тестовую выборки. Алгоритмы регрессии и классификации.<br>Практическое занятие:<br>1. Загрузка набора данных (активность против целевого белка).<br>2. Построение модели случайного леса с использованием Scikit-learn.<br>3. Оценка качества модели ( $R^2$ , RMSE).<br>Самостоятельная работа: Подбор гиперпараметров модели с помощью GridSearchCV.                                            | 8            |
| 3     | <b>Тема 3. Молекулярный докинг</b><br>Видеолекция: Основы молекулярного докинга. Понятие сайта связывания, scoring function. Жесткий и гибкий докинг.<br>Практическое занятие:<br>1. Подготовка файлов рецептора (белка) и лиганда.<br>2. Запуск докинга в AutoDock Vina (командная строка).<br>3. Анализ результатов: позы связывания, оценка аффинности.<br>Самостоятельная работа: Проведение докинга для набора лигандов и ранжирование по энергии связывания.                                                                                | 6            |
| 4     | <b>Тема 4. Основы работы в Maestro Schrodinger</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 8            |

| №<br>п/п | Наименование тем, виды учебной работы и краткое содержание учебного материала                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Объем,<br>часов |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|
|          | <p>Видеолекция: Интерфейс Maestro. Работа с панелями, импорт структур. Визуализация белков и лигандов. Основы подготовки систем.</p> <p>Практическое занятие:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Загрузка PDB-файла белка.</li> <li>2. Добавление лиганда, настройка отображения.</li> <li>3. Создание рабочей области для докинга.</li> </ol> <p>Самостоятельная работа: Подготовка 5 белков из PDB для дальнейшего докинга.</p>                                                                                                                                 |                 |
| 5        | <p><b>Тема 5. Алгоритм Glide</b></p> <p>Видеолекция: Алгоритм Glide (Schrodinger): этапы (конформационный поиск, оценка, уточнение). Параметры точности (SP, XP).</p> <p>Практическое занятие:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Запуск Glide через Maestro (подготовка рецептора, генерация сетки).</li> <li>2. Докинг библиотеки лигандов.</li> <li>3. Анализ отчёта Glide.</li> </ol> <p>Самостоятельная работа: Сравнение результатов докинга Glide и AutoDock Vina для одного набора лигандов.</p>                                                          | 6               |
| 6        | <p><b>Тема 6. Алгоритм ComFA</b></p> <p>Видеолекция: Comparative Molecular Field Analysis (ComFA). Принципы построения 3D-QSAR. Поля стерического и электростатического взаимодействия.</p> <p>Практическое занятие:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Выравнивание молекул.</li> <li>2. Расчёт полей в Sybyl или с помощью open-source аналогов.</li> <li>3. Построение PLS-модели.</li> </ol> <p>Самостоятельная работа: Интерпретация контурных карт ComFA.</p>                                                                                               | 6               |
| 7        | <p><b>Тема 7. Алгоритм LigandPrep</b></p> <p>Видеолекция: Предобработка лигандов: генерация 3D-структур, коррекция валентностей, добавление водоронов, генерация таутомеров и прототипов.</p> <p>Практическое занятие:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Запуск LigandPrep в Schrodinger.</li> <li>2. Обработка библиотеки из SDF-файла.</li> <li>3. Экспорт подготовленных лигандов в форматы для докинга.</li> </ol> <p>Самостоятельная работа: Создание скрипта для автоматической обработки лигандов с использованием RDKit (генерация 3D, минимизация).</p> | 6               |
| 8        | <p><b>Тема 8. Автоматизация виртуального скрининга биологически активных веществ</b></p> <p>Видеолекция: Конвейеры виртуального скрининга. Использование KNIME, Pipeline Pilot или Python-скриптов. Параллельный докинг.</p> <p>Практическое занятие:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Разработка Python-скрипта для автоматического запуска докинга всех лигандов из папки.</li> <li>2. Сбор результатов в единый DataFrame.</li> <li>3. Фильтрация по энергии связывания и ADMET-свойствам.</li> </ol>                                                        | 6               |

| №<br>п/п | Наименование тем, виды учебной работы и краткое содержание учебного материала                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Объем,<br>часов |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|
|          | Самостоятельная работа: Реализация полного пайплайна скрининга для базы из 1000 соединений.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                 |
| 9        | <b>Тема 9. Дизайн библиотек химических соединений</b><br>Видеолекция: Стратегии дизайна: комбинаторная химия, scaffold hopping, фрагментный подход. Учет правил Липински.<br>Практическое занятие:<br>1. Генерация виртуальной библиотеки с помощью RDKit (реакции, заместители).<br>2. Расчёт свойств и фильтрация по «правилу пяти».<br>3. Отбор соединений для синтеза.<br>Самостоятельная работа: Дизайн библиотеки ингибиторов заданной киназы с использованием анализа дескрипторов.              | 6               |
| 10       | <b>Тема 10. Алгоритм AlphaFold</b><br>Видеолекция: Прогнозирование структуры белка с помощью AlphaFold. Принципы работы, входные форматы (последовательность). Использование ColabFold и локальной установки.<br>Практическое занятие:<br>1. Запуск ColabFold для аминокислотной последовательности.<br>2. Загрузка предсказанной структуры в формате PDB.<br>3. Оценка качества модели (pLDDT).<br>Самостоятельная работа: Предсказание структуры для трёх белков-мишеней и подготовка их для докинга. | 8               |
| 11       | Аттестация по модулю в формате тестирования и защиты проекта (виртуальный скрининг с построением QSAR-модели и докингом)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 4               |

### 3. Учебно-тематический план рабочей программы модуля 3

| №<br>п/п | Наименование и краткое содержание структурного элемента (раздела) Программы | Количество часов |                      |                        |                      |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------|------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
|          |                                                                             | аудиторных       |                      | самостоятельной работы |                      |
|          |                                                                             | всего, часов     | практические занятия | всего, часов           | практические задания |
| 1.       | Тема 1. Молекулярные дескрипторы                                            | 4                | 2                    | 4                      | 2                    |
| 2.       | Тема 2. QSAR анализ                                                         | 4                | 2                    | 4                      | 2                    |
| 3.       | Тема 3. Молекулярный докинг                                                 | 2                | 0                    | 4                      | 2                    |
| 4.       | Тема 4. Основы работы в среде Maestro Shrodinger                            | 4                | 2                    | 4                      | 2                    |
| 5.       | Тема 5. Алгоритм Glide                                                      | 4                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 6.       | Тема 6. Алгоритм ComFA                                                      | 4                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 7.       | Тема 7. Алгоритм LigandPrep                                                 | 2                | 0                    | 4                      | 2                    |
| 8.       | Тема 8. Автоматизация виртуального скрининга                                | 4                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 9.       | Тема 9. Дизайн библиотек химических соединений                              | 4                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 10.      | Тема 10. Алгоритм AlphaFold                                                 | 4                | 2                    | 2                      | 2                    |
| 11.      | Промежуточная аттестация                                                    | 4                |                      |                        |                      |
| 12.      | Итого                                                                       | 70               |                      |                        |                      |

#### 4. Контроль и оценка результатов освоения рабочей программы модуля 3

Образовательная организация, реализующая рабочую программу, обеспечивает организацию и проведение текущего и промежуточного контроля демонстрируемых обучающимися образовательных результатов.

Текущий контроль проводится преподавателем на основе оценивания результатов практических работ и самостоятельной работы обучающихся. Промежуточный контроль проводится в форме тестирования и защиты итогового проекта (виртуальный скрининг + QSAR-модель). Формы и методы текущего и промежуточного контроля, критерии оценивания доводятся до сведения обучающихся в начале обучения.

Для текущего и промежуточного контроля создаются фонды оценочных средств (ФОС).

##### 4.1. Примеры оценочных средств

| Вопрос теста                                                                       | Варианты ответов                                                                                                                                 |
|------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Какой из перечисленных дескрипторов относится к топологическим?                    | Молекулярная масса / <b>Число связей</b> / LogP / TPSA                                                                                           |
| Какая библиотека Python используется для расчёта молекулярных дескрипторов?        | Scikit-learn / <b>RDKit</b> / TensorFlow / Matplotlib                                                                                            |
| Для чего применяется алгоритм Glide?                                               | Для предсказания вторичной структуры белка / <b>Для молекулярного докинга</b> / Для расчёта дескрипторов / Для визуализации траекторий           |
| Какая метрика качества используется в задаче регрессии QSAR?                       | Точность / <b>R<sup>2</sup></b> / F1-мера / AUC-ROC                                                                                              |
| Что позволяет оценить ComFA?                                                       | <b>3D-поля стерического и электростатического взаимодействия</b> / Последовательность аминокислот / Энергию связывания лиганда / Сходство SMILES |
| Какой инструмент используется для подготовки лигандов в Schrodinger?               | Glide / Prime / <b>LigandPrep</b> / Macromodel                                                                                                   |
| Что является входными данными для AlphaFold?                                       | PDB-файл белка / <b>Аминокислотная последовательность</b> / SMILES лиганда / 3D-координаты рецептора                                             |
| Какой из перечисленных дескрипторов относится к макроструктурным?                  | Молекулярная масса / Число связей / <b>LogP</b> / TPSA                                                                                           |
| Какая библиотека используется для расчёта траекторий упаковки вторичной структуры? | Scikit-learn / RDKit / <b>TensorFlow</b> / Matplotlib                                                                                            |
| Для чего применяется алгоритм MGBSA?                                               | Для предсказания вторичной структуры белка / Для молекулярного докинга / Для расчёта дескрипторов / <b>Для визуализации траекторий</b>           |

##### Пример задания на практическую работу (тема 8 – автоматизация скрининга):

1. Напишите Python-скрипт, который читает все SDF-файлы из папки ligands/, для каждого лиганда запускает докинг с помощью AutoDock Vina (используя подпроцесс) и сохраняет результат (имя лиганда, score, число поз) в CSV-файл.

2. Добавьте в скрипт фильтрацию лигандов по правилу Липински (расчёт дескрипторов через RDKit) перед докингом.

Пример задания на самостоятельную работу:

• Построить полную QSAR-модель для набора данных (предоставляется файл activity.csv с дескрипторами): разделить данные, обучить модель случайного леса, подобрать гиперпараметры,

оценить качество на тестовой выборке, построить график предсказанных vs истинных значений.

### **5. Образцы учебно-методических материалов для обучающихся и преподавателей**

Примеры заданий на практическую работу

#### Тема 1. Молекулярные дескрипторы

Установить RDKit и Jupyter Notebook.

Загрузить молекулы из файла molecules.sdf.

Для каждой молекулы рассчитать дескрипторы: LogP, MW, NumHAcceptors, NumHDonors.

Сохранить результат в DataFrame и вывести первые 5 строк.

#### Тема 2. QSAR анализ

Загрузить набор данных (файл qsar\_data.csv).

Выделить признаки и целевую переменную (pIC50).

Разделить выборку (train\_test\_split).

Построить модель регрессии (GradientBoostingRegressor).

Оценить качество по  $R^2$  и RMSE.

#### Тема 3. Молекулярный докинг

Скачать PDB-структуру белка (например, 1a42).

Подготовить файлы рецептора и лиганда с помощью MGLTools.

Создать конфигурационный файл для Vina.

Запустить докинг, проанализировать лучшую позу.

#### Тема 4. Основы Maestro

Импортировать белок из PDB ID.

Удалить лишние воды и лиганды.

Сохранить проект.

#### Тема 5. Алгоритм Glide

В Maestro подготовить рецептор через Protein Preparation Wizard.

Сгенерировать сетку (Receptor Grid Generation).

Выполнить докинг (Ligand Docking) в режиме SP.

Экспортировать top-5 поз.

#### Тема 6. Алгоритм ComFA

Выровнять молекулы по шаблону.

Рассчитать поля ComFA.

Построить PLS-модель и оценить предсказательную способность.

#### Тема 7. Алгоритм LigandPrep

Загрузить библиотеку лигандов в формате SDF.

Запустить LigandPrep с опциями: генерация таутомеров, pH=7.4.

Сохранить обработанные лиганды.

#### Тема 8. Автоматизация скрининга

Разработать скрипт, проходящий по всем SDF в папке.

Для каждого лиганда выполнить докинг.

Собрать таблицу результатов.

#### Тема 9. Дизайн библиотек

Взять базовый каркас (например, бензамид).

Сгенерировать 100 вариантов заместителей (различные R-группы).

Рассчитать LogP и TPSA, отфильтровать по правилу пяти.

#### Тема 10. AlphaFold

Взять последовательность белка из UniProt.

Запустить ColabFold (или локальный AlphaFold).

Загрузить предсказанную PDB-модель и визуализировать в PyMOL.

### **Примеры заданий на самостоятельную работу**

Создание информационной базы молекулярных дескрипторов для 200 соединений из открытой базы.

Сравнение трёх алгоритмов машинного обучения (случайный лес, SVM, нейронная сеть) для QSAR.

Проведение докинга библиотеки из 50 лигандов с помощью двух алгоритмов (Vina и Glide) и статистическое сравнение результатов.

Разработка автоматизированного конвейера: SMILES → дескрипторы → QSAR-прогноз → докинг → отчёт.

Дизайн библиотеки из 500 потенциальных ингибиторов целевого белка с использованием фрагментного подхода.

Предсказание структуры белка-мишени с помощью AlphaFold и последующий докинг библиотеки лигандов в эту модель.

### **Методическое обеспечение включает в себя:**

- Дополнительная профессиональная программа профессиональной переподготовки
- Материалы лекций
- Материалы практических занятий
- Информационные ресурсы сети «Интернет»
- Методические рекомендации и указания
- Фонды оценочных средств
- Список нормативных документов, основной и рекомендуемой литературы.

Для проведения учебных занятий, промежуточной и итоговой аттестации в режиме видеоконференцсвязи (вебинара) используется специализированная информационная система видеоконференцсвязи Яндекс Телемост. Для проведения прочих дистанционных мероприятий (форумы, чаты, прием и проверка результатов практических работ, тестирование, дистанционные консультации и т.д.), а также предоставления доступа слушателей к электронным информационным ресурсам и электронным образовательным ресурсам используется специализированная информационная система дистанционного обучения Moodle.

Преподавателям и слушателям предоставляется авторизованный доступ к информационным системам.

Контроль соблюдения условий проведения мероприятий, в рамках которых осуществляется оценка результатов обучения, обеспечивается специалистами центра электронного обучения, а также автоматически с помощью функционала СДО (lms.kantiana.ru).

Организация учебных занятий, проводимых в режиме видеоконференций (вебинаров), осуществляется специалистами центра электронного обучения и включает:

- информирование слушателей о технических требованиях к оборудованию и каналам связи;
- предварительную проверку связи со слушателями;
- создание и настройку вебинара в информационной системе видеоконференцсвязи;
- предоставление преподавателям и слушателям гиперссылки на URL-адрес (адрес ресурса в сети Интернет) вебинара;
- предоставление (при необходимости) рабочего места преподавателю, контроль состояния вебинара в процессе его проведения;
- запись вебинара;
- видеомонтаж вебинара (при необходимости);
- предоставление слушателям доступа к записи вебинара.

## **6. Кадровое обеспечение образовательного процесса**

| ФИО, должность                                                                                           | Модули (темы, лекции)                                                |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| Чупахин Евгений Геннадьевич, кандидат химических наук, доцент высшей школы живых систем БФУ им. И. Канта | Модуль 3. Компьютерный дизайн в открытии лекарств, Модуль «Практика» |

### **7. Материально-техническое обеспечение реализации рабочей программы модуля 3**

| Вид занятий                  | Наименование оборудования                                                                                                                                                                                                                                         |
|------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Лекции, практические занятия | Компьютерный класс с подключением к сети Интернет. Рекомендуемая конфигурация: ОС Windows 10/11 или Linux Ubuntu, процессор Intel i5/i7 (или AMD аналоги), 16 ГБ ОЗУ, 50 ГБ свободного дискового пространства. Наличие веб-камеры и микрофона для онлайн-занятий. |

#### **Перечень необходимого программного обеспечения:**

Python 3.9+ с библиотеками: RDKit, Pandas, NumPy, Scikit-learn, Matplotlib, Seaborn, Plotly, AutoDock Vina, PyMOL или Chimera.

- Maestro Schrodinger (академическая лицензия) с модулями Glide, LigandPrep, Prime.
- ColabFold или локальная установка AlphaFold (при наличии вычислительных ресурсов).
- Среда Jupyter Notebook / Jupyter Lab.
- Система дистанционного обучения (Moodle).

### **8. Информационное обеспечение реализации рабочей программы**

1. Leach, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications. – Pearson, 2001.
2. Varnek, A., Baskin, I. Chemoinformatics: A Textbook. – Wiley, 2023.
3. RDKit Documentation. <https://www.rdkit.org/docs/index.html>
4. Scikit-learn User Guide. [https://scikit-learn.org/stable/user\\_guide.html](https://scikit-learn.org/stable/user_guide.html)
5. Schrödinger Suite Documentation. <https://www.schrodinger.com/documentation>
6. AutoDock Vina User Guide. <http://vina.scripps.edu/>
7. Jumper, J. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature, 2021.
8. Mendez, D. et al. ChEMBL: towards direct deposition of bioassay data. Nucleic Acids Research, 2019.
9. Балакин, К.В. Компьютерный дизайн лекарственных средств: методы и алгоритмы. – М.: Лаборатория знаний, 2021.
10. Онлайн-курс «Python for Chemoinformatics» (Coursera / Stepik).
11. Сервис ColabFold: <https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold>
12. База данных белков RCSB PDB: <https://www.rcsb.org/>

## Практика/стажировка

**Целью** практики является знакомство с методами моделирования АФС для выбора молекул кандидатов в качестве разработки перспективных лекарственных аналогов. Моделирование физикохимических свойств примесей АФС и продуктов их распада с целью контроля качества ГЛС

Практика организована при сотрудничестве с фармацевтическими компаниями ООО «ИНФАМЕД К» и АО «Отисифарм Про» в виде индивидуальных или коллективных проектов.

### Планируемые результаты

Практика направлена на формирование у слушателей компетенций ID 182, ID 30, ID 15, ID 28, ID 37.

В результате прохождения практики слушатели будут:

- иметь представление о принципах и основах создания расчетных модулей с помощью языков программирования и их применения на химическом производстве;
- знать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач производственной деятельности;
- знать полуэмпирические модели при решении производственных задач химической направленности;
- уметь использовать базовые принципы и основы алгоритмизации и языков программирования при решении производственных задач;
- уметь применять полуэмпирические модели при решении задач химической технологии;
- владеть современными IT-технологиями при сборе, анализе, обработке и представлении информации для производственных задач;
- владеть методами и цифровыми моделями при решении задач производственных химической технологии.

### Содержание практики/стажировки

| №, наименование темы                                                                                                              | Содержание лекций                                                                      | Содержание и виды практических работ                           | Содержание и виды СР                                                                                               |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Практика на предприятии (24 ч.) (вариативно)</b>                                                                               |                                                                                        |                                                                |                                                                                                                    |
| Знакомство с химическим производством и цифровыми технологиями на производстве, в том числе моделирование и оптимизация процессов | 1. Знакомство с производством<br>2. Знакомство с нормативной документацией             | Знакомство с применяемыми цифровыми процессами на производстве | Практическая работа по поставленной задаче при наставничестве со стороны производства                              |
| <b>Стажировка по моделированию новых антисептиков на основе четвертичных аммониевых солей (24 ч.) (вариативно)</b>                |                                                                                        |                                                                |                                                                                                                    |
| Знакомство с производством ЧАС антисептиков                                                                                       | 1. Знакомство с производством<br>2. Изучение типов и химических структур известных ЧАС | Знакомство с биологическими мишенями ЧАС                       | Практическая работа по моделированию новых ЧАС и построению структур кандидатов новых ЧАС для синтеза и разработки |
| <b>Стажировка по моделированию процессов контроля качества ГЛС (24 ч.) (вариативно)</b>                                           |                                                                                        |                                                                |                                                                                                                    |

|                                |                                                                                |                                                   |                                                                  |
|--------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|
| Знакомство с методами контроля | 1. Знакомство с оборудованием для контроля качества ГЛС<br>2. Знакомство с АФС | Изучение главных примесей и продуктов распада АФС | СР Анализ и моделирование физико-химических свойств примесей АФС |
|--------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|

Содержание практики/стажировки определяется с учетом предложений организаций, направляющих слушателей на стажировку, содержания дополнительной профессиональной программы.

Сроки практики/стажировки определяются исходя из целей обучения.

Продолжительность практики/стажировки составляет 24 часа. Практика имеет групповой характер и может предусматривать такие виды деятельности как:

- знакомство с предприятием, организационной структурой, цифровыми технологиями на производстве;
- работу с технической документацией и др.
- работа с цифровыми программными продуктами, используемыми на производстве.

### Материально-технические условия реализации практики/стажировки

Практика/стажировка проводится на высокотехнологичных производствах фармацевтических компаний ООО «ИНФАМЕД К» и АО «Отисифарм Про». Руководитель практики/стажировки от предприятия назначается из числа ведущих специалистов и практиков компании.

Руководители практики от образовательной организации:

| ФИО                         | Должность                                                                      |
|-----------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| Чупахин Евгений Геннадьевич | кандидат химических наук, доцент высшей школы живых систем БФУ им. И. Канта    |
| Анищенко Юлия Владимировна  | кандидат технических наук, доцент Института «Умные материалы и технологии» ТГУ |

### Оценка качества освоения программы стажировки

В качестве подтверждения прохождения практики/стажировки на базе предприятий, организаций, учреждений для зачета результатов обучения в качестве раздела программы слушателями предъявляется Дневник прохождения практики/стажировки (Приложение 1) *(отчет в виде Дневника прохождения практики)*.

## VI. Итоговая аттестация по Программе

После завершения обучения по Программе обучающиеся допускаются к итоговой аттестации.

Аттестация проводится с участием представителей профильных индустриальных партнеров в формате оформления и представления результатов практики/стажировки, что предусматривает выполнение обучающимся профессиональных задач и оценку результатов и (или) процесса выполнения – проверку сформированности в рамках Программы цифровых компетенций.

Состав комиссии, перечень тем итоговых аттестационных работ, практических заданий и требований к выполнению разрабатывается и актуализируется при участии индустриальных партнеров.

Итоговая аттестационная работа является проектной работой, которая выполняется индивидуально или творческим коллективом.

Примерные темы проектов:

1. Разработка вычислительного модуля для решения кинетических задач;
2. Анализ химико-технологических систем с использованием стандартных или разработанных вычислительных модулей и выдача рекомендаций по улучшению процесса;
3. Анализ и моделирование физико-химических свойств примесей АФС;
4. Моделирование новых ЧАС и построение структур кандидатов новых ЧАС для синтеза и разработки.

Проект размещается в Электронном курсе программы.

### *Требования к итоговой аттестационной работе*

Итоговая аттестационная работа направлена на решение прикладной задачи и может носить исследовательский или проектный характер и должна состоять из следующих блоков:

- Постановка проблемы
- Цели и задачи
- План реализации исследования
- Используемые методы и подходы
- Источники данных
- Решение
- Результаты

*Критериями оценки итоговой аттестационной работы являются:*

- Наличие всех блоков итоговой работы
- Описаны тип и структура использованных данных
- Обоснованность поставленных задач и алгоритма решения
- Цель проекта достигнута

Работа защищается перед аттестационной комиссией и представляется с помощью устного доклада и презентации в PowerPoint или демонстрации работы вычислительного модуля. По результатам защиты работы аттестационная комиссия принимает решение о выдаче диплома.

## **VII. Завершение обучения по Программе**

Лицам, завершившим обучение по Программе и достигшим целевого уровня сформированности цифровых компетенций по результатам итоговой оценки и прошедших итоговую аттестацию, присваивается дополнительная ИТ-квалификация, установленная Программой.

При освоении Программы параллельно с получением высшего образования диплом о профессиональной переподготовке выдается не ранее получения соответствующего документа об образовании и о квалификации (за исключением лиц, имеющих среднее профессиональное или высшее образование).

Лицам, не прошедшим итоговую аттестацию или получившим на итоговой аттестации неудовлетворительные результаты, а также лицам, освоившим часть Программы и (или) отчисленным из образовательной организации высшего образования, реализующей Программу, выдается справка об обучении или о периоде обучения по образцу, самостоятельно устанавливаемому образовательной организацией высшего образования.

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ**

**ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта»**

**ДНЕВНИК ПРАКТИКИ/СТАЖИРОВКИ**

**Слушатель (студент)** \_\_\_\_\_  
(ФИО полностью)

**Наименование ДПП ПП** \_\_\_\_\_

**Место прохождения практик/стажировки (индустриальный партнер):** \_\_\_\_\_

**Руководитель практики/стажировки (от индустриального партнера):** \_\_\_\_\_  
(ФИО полностью, должность)

**Срок стажировки с** \_\_\_\_\_ **по** \_\_\_\_\_

- - -

**I. ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ, СОДЕРЖАНИЕ  
И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРАКТИКИ/СТАЖИРОВКИ**  
(описывается цель и задачи стажировки с учетом перечня осваиваемых компетенций)

**Цель стажировки –**

**Задачи стажировки:**

**Описание кейса –**

**II. РАБОЧИЙ ГРАФИК (ПЛАН) ПРОВЕДЕНИЯ ПРАКТИКИ/СТАЖИРОВКИ**

| <b>№ п/п</b> | <b>Краткое содержание выполненной работы</b> | <b>Количество часов</b> |
|--------------|----------------------------------------------|-------------------------|
| 1            | 2                                            | 3                       |
|              |                                              |                         |
|              |                                              |                         |
|              |                                              |                         |
|              |                                              |                         |

— — —

**III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ СЛУШАТЕЛЯ (СТУДЕНТА) ПО ИТОГАМ  
ПРАКТИКИ/СТАЖИРОВКИ И ЕГО ПРЕДЛОЖЕНИЯ**

---

---

---

---

---

---

---

(дата)

(подпись)

---

(И.О. Фамилия)