

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Алгоритмы в хемоинформатике

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): младший научный сотрудник, б/с Афонина В.А. (НИЛ Интеллектуальная химическая робототехника, Отдел органической химии), ValAAfonina@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- Знать простые типы данных: целые числа, числа с плавающей запятой.
- Знать составные типы данных: массивы чисел, строки.
- Знать приоритеты математических (булевых в том числе) операций
- Знать алгоритм сортировки пузырьком.
- Знать алгоритм поиска в массиве бисекцией.
- Знать структуру данных граф.
- Знать алгоритмы поиска пути в графе. В глубину и ширину.
- Знать что такое чистые функции

Должен уметь:

- Уметь описывать операции сравнения блок-схемами.
- Уметь описывать циклы комбинацией блок-схем и стрелок движения по алгоритму.
- Уметь описывать работу с элементами массивов
- Уметь разбивать сложные задачи на фрагменты.
- Уметь делать логичный вывод функций.
- Уметь реализовывать игру жизнь.
- Уметь переводить алгоритмы описанные блок-схемами в код на языке программирования Python.

Должен владеть:

- навыками сортировки массивов
- навыками правильно выбирать необходимые аргументы для функций

Должен демонстрировать способность и готовность:

- Разбираться в блок-схемах для составления алгоритмов.
- Различать блоки начала/конца программы, выполнения операций, ветвлений.
- Разбираться в двоичном счислении.
- Разбираться в булевой алгебре. Операции AND NOT OR XOR
- Понимать важность сортировки массивов.
- Понимать суть операций свертки.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "ФТД.N.01 Факультативные дисциплины" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к факультативным дисциплинам.

Осваивается на 1, 2 курсах в 1, 2, 3 семестрах.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 56 часа(ов), в том числе лекции - 10 часа(ов), практические занятия - 46 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 88 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: отсутствует в 1 семестре; отсутствует во 2 семестре; зачет в 3 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Двоичное счисление. Булева алгебра. Операции AND NOT OR XOR. Приоритеты математических (булевых в том числе) операций	1	1	0	2	0	0	0	4
2.	Тема 2. Простые типы данных: целые числа, числа с плавающей запятой	1	1	0	1	0	0	0	2
3.	Тема 3. Составные типы данных: массивы чисел, строки.	1	1	0	1	0	0	0	2
4.	Тема 4. Блок-схемы для составления алгоритмов	1	1	0	3	0	0	0	5
5.	Тема 5. Алгоритмы работы с элементами массивов	1	1	0	1	0	0	0	3
6.	Тема 6. Сортировки массивов. Сортировка пузырьком	1	1	0	2	0	0	0	4
7.	Тема 7. Алгоритмы поиска в массиве. Прямой поиск. Поиск бисекцией	1	1	0	2	0	0	0	4
8.	Тема 8. Структура данных граф. Алгоритмы поиска пути в графе. В глубину и ширину	1	3	0	2	0	0	0	6
9.	Тема 9. Операции свертки матриц. Игра жизнь. Имплементация на языке программирования Python	2	0	0	10	0	0	0	15
10.	Тема 10. Имплементация алгоритмов работы с графами на языке программирования Python	2	0	0	14	0	0	0	15
11.	Тема 11. LSTM для генерации молекул. Имплементация на Python	3	0	0	4	0	0	0	14
12.	Тема 12. Сверточные графовые нейронные сети. Имплементация на Python	3	0	0	4	0	0	0	14
	Итого		10	0	46	0	0	0	88

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Двоичное счисление. Булева алгебра. Операции AND NOT OR XOR. Приоритеты математических (булевых в том числе) операций

Основные понятия о системах счисления. Двоичная система счисления - ее распространенность и применение. Булева алгебра: три основные логические операции с высказываниями, аксиомы (законы) алгебры логики для выполнения этих операций, логические выражения (простые и сложные). Операция NOT? логическое отрицание (инверсия). Операция OR? логическое сложение (дизъюнкция, объединение). Операция AND? логическое умножение (конъюнкция). Операция XOR. Приоритеты операций в Python.

Тема 2. Простые типы данных: целые числа, числа с плавающей запятой

Простые типы данных: целые числа, числа с плавающей запятой.

Различие беззнаковых целых чисел и целых чисел со знаком. Короткие и длинные целые числа. Зависимость от платформы. Операции битового сдвига. Сравнение чисел с плавающей запятой - машинный эпсилон. Проблема деления и умножения малых чисел с плавающей запятой.

Тема 3. Составные типы данных: массивы чисел, строки.

Составные типы данных: массивы чисел, строки.

Внутреннее устройство массивов. Хранение значений в массивах или адресов значений.

Одномерные или двумерные массивы. Массивы массивов. Строки как массивы. Массивы произвольной длины. Достоинства и недостатки массивов с произвольной длиной и фиксированной.

Тема 4. Блок-схемы для составления алгоритмов

Блок-схемы для составления алгоритмов. Основные элементы схем алгоритма в соответствии с ГОСТ: действие, данные, предопределенный процесс, вопрос, ограничитель, цикл, соединитель, комментарий, параллельные действия. Как читать блок-схемы алгоритмов. Как составлять блок-схему для решения задачи. Перенос блок-схемы в Python.

Тема 5. Алгоритмы работы с элементами массивов

Алгоритмы для работы с одномерными массивами: поиск минимального элемента в массиве, поиск максимального элемента, последовательный поиск. Добавление и удаление элементов в динамическом массиве, замена элементов в динамическом и статическом массиве. Получение значения элемента массива. Получение значений группы элементов массива.

Тема 6. Сортировки массивов. Сортировка пузырьком

Виды сортировки массивов. Сортировка пузырьком: понятие, алгоритм, реализация на Python.

Алгоритм состоит из повторяющихся проходов по сортируемому массиву. За каждый проход элементы последовательно сравниваются попарно и, если порядок в паре неверный, выполняется обмен элементов. Проходы по массиву повторяются $N-1$ раз или до тех пор, пока на очередном проходе не окажется, что обмены больше не нужны, что означает - массив отсортирован.

Тема 7. Алгоритмы поиска в массиве. Прямой поиск. Поиск бисекцией

Алгоритмы поиска в массиве. Прямой поиск: понятие, алгоритм, реализация на Python.. Поиск бисекцией: понятие, алгоритм, реализация на Python.

Метод бисекции или метод деления отрезка пополам - простейший численный метод для решения нелинейных уравнений вида $f(x)=0$. Предполагается только непрерывность функции $f(x)$. Поиск основывается на теореме о промежуточных значениях.

Тема 8. Структура данных граф. Алгоритмы поиска пути в графе. В глубину и ширину

Представление о графе. Алгоритмы, специфичные для графов. Виды поиска пути в графе. Алгоритм поиска в глубину: понятие, алгоритм. Алгоритм поиска в ширину: понятие, алгоритм.

Использование стандартных структур данных Python для хранения графов. Матрицы связности. использование раскраски узлов графа и ребер.

Тема 9. Операции свертки матриц. Игра жизнь. Имплементация на языке программирования Python

Операции свертки матриц. Имплементация на языке программирования Python игры "Жизнь". Правила игры:

Место действия этой игры ? вселенная? ? это размеченная на клетки поверхность или плоскость ? безграничная, ограниченная, или замкнутая (в пределе ? бесконечная плоскость).

Каждая клетка на этой поверхности может находиться в двух состояниях: быть ?живой? (заполненной) или быть ?мёртвой? (пустой). Клетка имеет восемь соседей, окружающих её.

Распределение живых клеток в начале игры называется первым поколением. Каждое следующее поколение рассчитывается на основе предыдущего по таким правилам:

в пустой (мёртвой) клетке, рядом с которой ровно три живые клетки, зарождается жизнь;

если у живой клетки есть две или три живые соседки, то эта клетка продолжает жить; в противном случае, если соседей меньше двух или больше трёх, клетка умирает (?от одиночества? или ?от перенаселённости?)

Игра прекращается, если

на поле не останется ни одной ?живой? клетки

конфигурация на очередном шаге в точности (без сдвигов и поворотов) повторит себя же на одном из более ранних шагов (складывается периодическая конфигурация)

при очередном шаге ни одна из клеток не меняет своего состояния (складывается стабильная конфигурация; предыдущее правило, вырожденное до одного шага назад)

Эти простые правила приводят к огромному разнообразию форм, которые могут возникнуть в игре.

Тема 10. Имплементация алгоритмов работы с графами на языке программирования Python

Имплементация алгоритмов работы с графами на языке программирования Python: алгоритм поиска в глубину; алгоритм поиска в ширину.

Поиск в глубину - один из методов обхода графа. Стратегия поиска в глубину, как и следует из названия, состоит в том, чтобы идти "вглубь" графа, насколько это возможно.

Поиск в ширину - метод обхода графа и поиска пути в графе. Поиск в ширину является одним из неинформированных алгоритмов поиска.

Тема 11. LSTM для генерации молекул. Имплементация на Python

Долгая краткосрочная память - разновидность архитектуры рекуррентных нейронных сетей, предложенная в 1997 году Сеппом Хохрайтером и Юргеном Шмидхубером. Как и большинство рекуррентных нейронных сетей, LSTM-сеть является универсальной в том смысле, что при достаточном числе элементов сети она может выполнить любое вычисление, на которое способен обычный компьютер.

Тема 12. Сверточные графовые нейронные сети. Имплементация на Python

Сверточные графовые нейронные сети. Представление. Имплементация на Python.

Свёрточная нейронная сеть - специальная архитектура искусственных нейронных сетей нацеленная на эффективное распознавание образов.

Работа свёрточной нейронной сети обычно интерпретируется как переход от конкретных особенностей изображения к более абстрактным деталям, и далее к ещё более абстрактным деталям вплоть до выделения понятий высокого уровня.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

stackoverflow - <https://stackoverflow.com/>

Документация Python - <https://www.python.org/doc/>

Язык программирования Python 3 для начинающих и чайников - <https://pythonworld.ru/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.
практические занятия	Практические занятия включают выполнение задач по теме занятия. Эти задачи должны быть выполнены до конца занятия. Если студент не успевает, то он должен доделать задания дома, и предоставить результат преподавателю на следующем занятии. Если обучающийся пропускает занятие, он также должен решить все задачи по теме занятия и предоставить результат преподавателю.
самостоятельная работа	Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, устным опросам и контрольной работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания. Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярно повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Вид работ	Методические рекомендации
зачет	Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Основная литература:

1. Окулов, С. М. Программирование в алгоритмах : учебное пособие / С. М. Окулов. - 7-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 386 с. - ISBN 978-5-93208-521-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/172252> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Бабенко, М. А. Введение в теорию алгоритмов и структур данных / М. А. Бабенко, М. В. Левин. - Москва : МЦНМО, 2016. - 144 с. - ISBN 978-5-4439-2396-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/80136> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Андрианова, А. А. Алгоритмизация и программирование. Практикум : учебное пособие / А. А. Андрианова, Л. Н. Исмагилов, Т. М. Мухтарова. - Санкт-Петербург : Лань, 2019. - 240 с. - ISBN 978-5-8114-3336-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/113933> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Павлов, Л. А. Структуры и алгоритмы обработки данных : учебник для вузов / Л. А. Павлов, Н. В. Первова. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 256 с. - ISBN 978-5-8114-7259-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/156929> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
2. Канцедаль, С. А. Алгоритмизация и программирование : учебное пособие / С. А. Канцедаль. - Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2021. - 352 с. - (Среднее профессиональное образование). - ISBN 978-5-8199-0727-6. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1189320> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
3. Гуриков, С. Р. Основы алгоритмизации и программирования на Python : учебное пособие / С.Р. Гуриков. - Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2021. - 343 с. - (Среднее профессиональное образование). - ISBN 978-5-00091-553-0. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1217737> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
4. Колдаев, В. Д. Основы алгоритмизации и программирования : учебное пособие / В. Д. Колдаев ; под ред. проф. Л. Г. Гагариной. - Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2021. - 414 с. - (Среднее профессиональное образование). - ISBN 978-5-8199-0733-7. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1151517> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
5. Окулов, С. М. Алгоритмы обработки строк : учебное пособие / С. М. Окулов. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 258 с. - ISBN 978-5-00101-658-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/135553> (дата обращения: 27.05.2021). - Режим доступа : по подписке.

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.