

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 06.05.2026 15:06:44
Уникальный программный ключ:
ca953a01204891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»
Институт фармации и биотехнологии**

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.04.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

БИОХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Компьютерные технологии в научных исследованиях» входит в программу магистратуры «Биохимические технологии и нанотехнологии» по направлению 04.04.01 «Химия» и изучается во 2 семестре 1 курса. Дисциплину реализует Кафедра фармации и биотехнологии. Дисциплина состоит из 7 разделов и 26 тем и направлена на изучение фундаментальных основ и практических аспектов применения компьютерных технологий в современных научных исследованиях.

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов профессиональных компетенций в сфере использования современных компьютерных технологий для эффективного сбора, обработки, анализа, визуализации и представления научных данных, а также для повышения качества и результативности научно-исследовательской деятельности.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-7	Способен к использованию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры	УК-7.1 Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; УК-7.2 Проводит оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных; УК-7.3 Представляет результаты своей деятельности на корпоративных информационных платформах.;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерные технологии в научных исследованиях» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-7	Способен к	Актуальные вопросы	Преддипломная практика;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	использованию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры	современной химии и биохимии; Информационные базы данных;	

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» составляет «3» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			2
Контактная работа, ак.ч.	36		36
Лекции (ЛК)	18		18
Лабораторные работы (ЛР)	0		0
Практические/семинарские занятия (СЗ)	18		18
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	54		54
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	18		18
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108	108
	зач.ед.	3	3

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерные технологии в научных исследованиях» составляет «3» зачетные единицы.

Таблица 4.2. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очно-заочной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			2
Контактная работа, ак.ч.	36		36
Лекции (ЛК)	18		18
Лабораторные работы (ЛР)	0		0
Практические/семинарские занятия (СЗ)	18		18
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	54		54
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	18		18
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108	108
	зач.ед.	3	3

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Основы компьютерных технологий в научных исследованиях	1.1	Роль компьютерных технологий в современных научных исследованиях	История и этапы внедрения компьютерных технологий в науку. Классификация программных инструментов по областям применения. Влияние цифровизации на скорость и качество научных исследований. Примеры прорывных открытий, обусловленных применением вычислительных методов.	ЛК, СЗ
		1.2	Типы цифровых данных в исследованиях по биохимическим технологиям, нанотехнологиям и фармацевтике	Структурированные, неструктурированные и полуструктурированные данные. Первичные и вторичные данные в биохимии, нанотехнологиях и фармацевтике. Геномные, протеомные, метаболомные данные. Требования к качеству данных и методы их верификации	ЛК, СЗ
		1.3	Форматы файлов и принципы организации научных данных	Основные форматы хранения научных данных: CSV, JSON, XML, HDF5, FASTA, PDB и др. Принципы именования файлов и организации папочной структуры. Метаданные и их роль в документировании эксперимента. Открытые форматы данных и стандарты FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable)	ЛК, СЗ
		1.4	Обзор программных пакетов для научных исследований	Обзор пакетов общего назначения: Microsoft Office, LibreOffice, LaTeX. Специализированное ПО для биохимии и нанотехнологий: OriginPro, GraphPad Prism, Avogadro, VESTA. Свободно распространяемые инструменты с открытым исходным кодом: R, Python, ImageJ. Критерии выбора программного обеспечения под конкретную научную задачу	ЛК, СЗ
Раздел 2	Программное обеспечение для управления научной информацией	2.1	Системы управления библиографической информацией	Назначение и функции менеджеров ссылок. Обзор популярных систем: Zotero, Mendeley, EndNote, JabRef. Импорт ссылок из баз данных PubMed, Scopus, Web of Science. Создание библиографических списков в различных стилях оформления (APA, Vancouver, GOST 7.0.5). Совместная работа с литературой в группе.	ЛК, СЗ
		2.2	Программное обеспечение для организации экспериментальных данных	Структурирование экспериментальных данных в таблицах Excel и Google Sheets. Использование баз данных (Access, SQLite) для хранения результатов опытов. Принципы версионирования данных и контроля изменений. Инструменты резервного копирования и облачного хранения: OneDrive, Google Drive, Nextcloud.	ЛК, СЗ

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
		2.3	Электронные лабораторные журналы и системы управления лабораторной информацией	Понятие электронного лабораторного журнала (ELN) и его преимущества перед бумажным. Обзор систем ELN: LabArchives, Benchling, RSpace, eLabFTW. Системы управления лабораторной информацией (LIMS): структура, функции, интеграция с оборудованием. Требования к документированию эксперимента согласно GLP/GMP-стандартам	ЛК, СЗ
Раздел 3	Анализ и обработка научных данных	3.1	Основы статистического анализа данных в научных исследованиях	Описательная статистика: среднее, медиана, дисперсия, стандартное отклонение. Проверка нормальности распределения: критерии Шапиро–Уилка, Колмогорова–Смирнова. Параметрические и непараметрические методы сравнения групп (t-критерий, критерий Манна–Уитни). Корреляционный анализ. Ошибки первого и второго рода, уровень значимости, мощность критерия	ЛК, СЗ
		3.2	Программные пакеты для статистической обработки данных	Работа с пакетом Statistica: ввод данных, базовые статистические тесты, графический вывод. Среда R: базовые пакеты stats, ggplot2, dplyr для анализа и визуализации данных. Среда Python: библиотеки Pandas, SciPy, Statsmodels. SPSS как инструмент социальных и биомедицинских исследований. Сравнительный анализ возможностей пакетов	ЛК, СЗ
		3.3	Технологии обработки экспериментальных данных в профильных областях	Обработка спектроскопических данных (ИК, УФ, ЯМР, масс-спектрометрия). Анализ данных динамического светорассеяния (DLS) и электронной микроскопии (ТЭМ, СЭМ) в нанотехнологиях. Обработка хроматографических данных (ВЭЖХ, ГХ). Специализированные программы: SpectraGryph, ImageJ, MestReNova	ЛК, СЗ
		3.4	Методы анализа больших массивов данных	Понятие Big Data в контексте научных исследований. Методы снижения размерности: PCA, t-SNE, UMAP. Кластерный анализ: иерархическая кластеризация, метод k-средних. Биоинформатические конвейеры обработки геномных данных (RNA-seq, ChIP-seq). Инструменты параллельных вычислений и облачных платформ: Galaxy, Google Colab.	ЛК, СЗ
Раздел 4	Визуализация научных данных	4.1	Принципы эффективной визуализации научных данных	Основные принципы визуального восприятия информации (законы Гештальта, соотношение «чернила к данным»). Выбор типа графика в зависимости от природы данных. Типичные ошибки при построении графиков: манипуляция осями, избыточные элементы. Требования к рисункам в научных	ЛК, СЗ

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				журналах: разрешение, цветовые модели, шрифты.	
		4.2	Типы графиков и диаграмм для представления научных результатов	Точечные и линейные графики, гистограммы, ящики с усами (boxplot), скрипичные диаграммы. Тепловые карты (heatmap) и дендрограммы для многомерных данных. Диаграммы рассеяния с регрессионными кривыми. Специализированные диаграммы: volcano plot, MA-plot, Manhattan plot в биоинформатике.	ЛК, СЗ
		4.3	Программные средства для создания научной графики	Построение графиков в OriginPro и GraphPad Prism. Векторная графика в программах Adobe Illustrator и Inkscape. Библиотека ggplot2 (R) и Matplotlib/Seaborn (Python) для программируемой визуализации. Инструменты для молекулярной графики: PyMOL, ChimeraX, VESTA. Требования к форматам: SVG, EPS, TIFF для публикаций	ЛК, СЗ
		4.4	Создание комплексных визуализаций для научных публикаций	Разработка многопанельных рисунков с аннотациями. Компоновка графических абстрактов (graphical abstract). Согласование цветовой схемы и стиля в рамках одной статьи. Инструменты для создания схем и диаграмм: BioRender, ChemDraw, Draw.io. Подготовка иллюстраций для презентаций и постеров	ЛК, СЗ
Раздел 5	Специализированные базы данных и информационные ресурсы	5.1	Обзор специализированных баз данных по направлению подготовки	Базы данных по химии и биохимии: PubChem, ChemSpider, ChEMBL, BRENDA. Базы данных по нанотехнологиям: eNanoMapper, NanoHUB. Фармацевтические базы данных: DrugBank, PharmGKB. Базы данных белковых структур: PDB. Геномные и транскриптомные базы данных: NCBI, Ensembl, UniProt	ЛК, СЗ
		5.2	Стратегии эффективного поиска научной информации	Булевы операторы и усечение в поисковых запросах. Использование фильтров в PubMed, Scopus и Web of Science: дата, тип документа, импакт-фактор. MeSH-термины как инструмент систематизации медицинской литературы. Алертные системы и RSS-подписки для мониторинга новых публикаций. Оценка качества источников: импакт-фактор, квартиль журнала, индексы цитирования	ЛК, СЗ
		5.3	Использование онлайн-ресурсов для исследований в профильной области	Открытый доступ к научным данным: PubMed Central, arXiv, SSRN, Zenodo. Репозитории наборов данных: Figshare, Dryad, PANGAEA. Онлайн-инструменты для молекулярного моделирования и докинга: SwissDock, AutoDock Vina Online.	ЛК, СЗ

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				Платформы для воспроизводимых исследований: GitHub, OSF (Open Science Framework)	
Раздел 6	Компьютерные технологии в представлении результатов исследований	6.1	Технологии подготовки научных публикаций	Структура научной статьи (IMRAD) и требования к оформлению рукописей. Работа в текстовых редакторах с научным содержимым: Microsoft Word, LaTeX (Overleaf). Оформление формул, таблиц и рисунков согласно требованиям журналов. Проверка рукописи на антиплагиат: iThenticate, Antiplagiat. Процесс рецензирования и ответ на комментарии рецензентов	ЛК, СЗ
		6.2	Создание эффективных научных презентаций	Принципы разработки слайдов: правило одной идеи, минимализм, читаемость. Работа в Microsoft PowerPoint и Google Slides для академических презентаций. Создание постеров для конференций: структура, инструменты (PowerPoint, Canva, Inkscape). Особенности устного выступления: структура доклада, управление временем, ответы на вопросы	ЛК, СЗ
		6.3	Подготовка научно-технической документации	Виды научно-технической документации: отчёты, технические задания, паспорта методик, патентные заявки. Требования ГОСТ к оформлению научно-технических отчётов. Оформление патентной документации: формула изобретения, описание, чертежи. Подготовка грантовых заявок: структура, требования фондов	ЛК, СЗ
		6.4	Технологии совместной работы и обмена научными данными	Инструменты совместного редактирования документов: Google Workspace, Microsoft 365 Online. Системы контроля версий кода и данных: Git, GitHub, GitLab. Платформы для коллаборативных исследований: ResearchGate, Overleaf, OSF. Обмен данными внутри лаборатории: облачные хранилища, VPN-доступ, корпоративные порталы. Этика совместного использования данных и вопросы авторства	ЛК, СЗ
Раздел 7	Применение искусственного интеллекта в научных исследованиях	7.1	Основы искусственного интеллекта и машинного обучения в науке	Понятие и классификация методов искусственного интеллекта: машинное обучение, глубокое обучение, нейронные сети. Типы задач ИИ: классификация, регрессия, кластеризация, генерация. Обзор ключевых алгоритмов: случайный лес, градиентный бустинг, сверточные и рекуррентные сети. Инструментальные среды: TensorFlow, PyTorch, scikit-learn. Применение ИИ в профильных областях: биохимия, нанотехнологии,	ЛК, СЗ

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				фармацевтика	
		7.2	Генеративные языковые модели как инструмент научной работы	Принципы работы больших языковых моделей (LLM): трансформерная архитектура, предобучение и тонкая настройка. Практическое применение ChatGPT, Claude, Gemini и аналогов для поддержки научной деятельности: реферирование литературы, формулировка гипотез, написание и редактирование текстов. Специализированные научные ИИ-инструменты: Elicit, Consensus, ResearchRabbit, Semantic Scholar. Критическая оценка достоверности ответов языковых моделей: галлюцинации, проверка источников. Этика использования ИИ в научных публикациях: требования журналов и позиция Комитета по этике публикаций (COPE).	ЛК, СЗ
		7.3	Применение ИИ для анализа данных и предсказательного моделирования	Применение нейронных сетей для анализа изображений: микроскопия, спектроскопия, электронная микроскопия наноматериалов. Предсказание структуры белков с помощью AlphaFold2 и ESMFold: принципы работы, интерпретация результатов. Молекулярный докинг с элементами машинного обучения: AutoDock-GPU, Gnina. ИИ в разработке лекарственных препаратов и наноматериалов: генеративный дизайн молекул, предсказание токсичности. Автоматизация обработки экспериментальных данных с помощью Python-скриптов и ИИ-ассистентов	ЛК, СЗ
		7.4	Практикум по применению ИИ-инструментов в научном исследовании	Практическая работа с языковыми моделями: составление промптов для поиска и систематизации литературы, генерации разделов рукописи. Работа с AlphaFold2 через ColabFold: предсказание и визуализация структур белков. Применение инструментов машинного обучения для анализа собственных экспериментальных данных (на примере задач из профильной области). Оценка качества ИИ-генерированного контента и верификация научной достоверности. Разработка рабочего процесса (workflow) с интеграцией ИИ-инструментов в научное исследование	ЛК, СЗ

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Комплект специализированной мебели; технические средства: Мультимедийный проектор Everycom. Ноутбук Lenovo Thinkpad L530 Intel Core i3-2370M_2.4GHz/DDR3 4 GB. Обеспечен выход в интернет.
Семинарская	Аудитория для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Комплект специализированной мебели; технические средства: Мультимедийный проектор Everycom. Ноутбук Lenovo Thinkpad L530 Intel Core i3-2370M_2.4GHz/DDR3 4 GB. Обеспечен выход в интернет.
Для самостоятельной	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для	Учебная аудитория для проведения занятий

работы	проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Комплект специализированной мебели; технические средства: Мультимедийный проектор Everycom. Ноутбук Lenovo Thinkpad L530 Intel Core i3-2370M_2.4GHz/DDR3 4 GB. Обеспечен выход в интернет.
--------	---	---

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Алексеев, Д. С. Технологии интеллектуального анализа данных / Д. С. Алексеев, О. В. Щекочихин. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2024. — 176 с. — ISBN 978-5-507-48763-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/362915>

2. Математические методы в биологии: анализ биологических данных в системе Statistica : учебное пособие для вузов / С. Н. Гашев, Ф. Х. Бетляева, М. Ю. Иванова, К. Р. Цицкиева. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 181 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-18668-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/545309>

Дополнительная литература:

1. Кручинин, В. В. Компьютерные технологии в научных исследованиях : учебно-методическое пособие / В. В. Кручинин. — Москва : ТУСУР, 2012. — 56 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/11269>

2. Компьютерные технологии в научных исследованиях : учебное пособие / Е. Н. Косова, К. А. Катков, О. В. Вельц [и др.]. — Ставрополь : СКФУ, 2015. — 241 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/155228>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации
<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Компьютерные технологии в научных исследованиях».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент

Должность, БУП

Подпись

Кезимана Парфэ

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Должность БУП

Подпись

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Директор

Должность, БУП

Подпись

Ромашенко Виктория
Александровна

Фамилия И.О.