

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

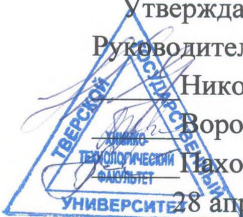
Дата подписания: 05.09.2022 08:35:24

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:  
Руководители ООП:  
Никольский В.М.  
Ворончихина Л.И.  
Пахомов П.М.  
28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Компьютерные технологии в науке и образовании

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

Аналитическая химия

Органическая химия

Физическая химия

Для студентов 1 курса

Очная форма

Составитель: к.х.н., доцент Павлов А.С.

Тверь, 2021 г.

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины:

Учебная дисциплина «Компьютерные технологии в науке и образовании» входит в обязательную часть цикла дисциплин подготовки магистрантов по всем четырём специализациям химико-технологического факультета – аналитическая, органическая, физическая химия и химия высокомолекулярных соединений. Кроме этого, она отвечает потребностям подготовки дополнительной квалификации «Преподаватель».

**Уровень начальной подготовки.** По своему содержанию курс имеет целью покрыть дистанцию от курса «Информатика» (базовый курс) до современного уровня химика-исследователя и преподавателя химии. Он предполагает наличие у обучающегося начальных знаний химической информатики, а также практически закреплённых навыков работы на персональном компьютере и в сети интернет.

**Цель дисциплины** – задача упреждающей подготовки с тем, чтобы снабдить магистров навыками к самостоятельной работе в тех областях информационных технологий, которые в настоящее время только формируются, однако будут остро востребованы в течение 5-10 лет после завершения формального образования. В порядке практического приложения получаемых навыков магистранты в течение курса осваивают расчётные методы химических исследований, выполняют расширенный поиск литературы и интернет-ресурсов (литературный обзор) для одновременно подготавливаемых магистерских диссертаций.

### **Формирование и развитие у обучающихся следующих компетенций:**

- Ознакомление с многопроцессорными параллельными распределёнными (cloud) архитектурами и методами вычислений
- Освоение мобильных платформ, методов коллективной работы над проектами и альтернативных (по отношению к Microsoft Office) офисных пакетов программ
- Изучение и практическое освоение новых обучающих сред – подкастов, вебинаров, блогов, интернет-каналов в области химии
- Практическое освоение методов простого и расширенного поиска в Интернете,
- Знакомство с электронными источниками химической информации: Химические журналы и специализированные сайты в Интернете. Каталоги и химические базы данных Сетевые энциклопедии как источники для самообразования.

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен знать с перспективой на пять лет основные тенденции развития информационных технологий в химии и химическом образовании, практически применять их в своей исследовательской работе и подготовке магистерской диссертации.**

*Формы контроля:* рейтинг-контроль, зачет, экзамен.

Целями освоения дисциплины являются:

- Освоение распределенных (cloud) методов вычислений
- Обучение коллективным методом работы над проектами на облаке
- Освоение мобильных платформ и методов коллективной работы над проектами
- Ознакомление с многопроцессорными параллельными методологиями вычислений
- \*Альтернативные (по отношению к Microsoft Office) офисные пакеты программ
- Изучение и практическое освоение новых обучающих сред – подкастов, вебинаров, блогов, интернет-каналов
- Практическое освоение методов простого и расширенного поиска в Интернете,
- Источники химической информации: Химические журналы и специализированные сайты в Интернете. Сетевые энциклопедии как источники для самообразования.
- Ознакомление с химическими каталогами и химическими базами данных.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП:**

Дисциплина «Компьютерные технологии в науке и образовании» является заключительным курсом в цикле подготовке магистров в области информационных технологий («Информатика» - базовый курс). Ряд дисциплин циклов бакалавриата и магистратуры по задачам и методам связаны с данным курсом. Это курсы строения вещества, квантовой механики и квантовой химии, электрохимии, конформационного анализ, физико-химии полимеров, физических методов исследования вещества, а также ряд практикумов. Практически все химические и технологические курсы требуют развитых средств молекулярной графики (молекулярные редакторы), и средств контроля знаний – тестирования, доступа к химическим энциклопедиям и базам данных, что составляет основное содержание курса. При его прохождении закрепляются, систематизируются и обновляются знания, полученные при прохождении химических дисциплин. Два из основных курсов - квантовой механики и квантовой химии и компьютерного моделирования особенно тесно интегрированы с нашим курсом, они пользуются общими программными средствами. Таким образом, интеграция курса компьютерных технологий с основными курсами профессионального образования химиков тесная и всесторонняя. Базовыми же предшествующими знаниями магистрантов снабжают курсы высшей математики, информатики, физики, общей и органической химии, а также, что немаловажно, курс английского языка.

## **3. Объем дисциплины:**

**4** зачетные единицы, **144** академических часов, **в том числе**

**контактная аудиторная работа:** лекции - **15** часов, практические занятия - **15** часов, в том числе практическая подготовка -**15** часов;

самостоятельная работа: 87 час, контроль - 27 часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы:**

<b>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине</b>
<b>ОПК-1</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук. ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.
<b>ОПК-3</b> Способен использовать вычислительные методы...	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля; ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные... ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы...

**5. Форма промежуточной аттестации:** 1 семестр – зачет; 2 семестр – экзамен.

**6. Язык преподавания:** русский.

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Наименование разделов и тем	Всего	Аудиторные занятия		Самостоятельная работа	Контроль
		Лекции	Практические работы		
<b>Движущие силы развития информационных технологий</b>	28	3	3	17	5
<b>Интернет и архитектуры компьютерных сетей.</b>	28	3	3	17	5
<b>Поисковые средства сети Интернет</b>	28	3	3	17	5
<b>Параллельные вычисления.</b>	28	3	3	17	5
<b>Новые жанры. Неткасты, вебинары, видеоконференции и блоги. Коллективные методы работы в сети Интернет.</b>	32	3	3	19	7
<b>ИТОГО</b>	144	15	15	87	27

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Движущие силы развития информационных технологий	<ul style="list-style-type: none"> <li>• лекция,</li> <li>• практические занятия в компьютерном классе,</li> <li>• проверка домашних заданий</li> <li>• занятия в режиме on-line</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений),</li> <li>• цифровые (показ презентаций)</li> <li>• Совместная работа над документами и проведения совместного поиска в сети-занятия в режиме on-line</li> <li>• Удаленные видеоконференции по материалам курса в режиме on-line</li> </ul>
2. Интернет и архитектуры компьютерных сетей.		
3. Поисковые средства сети Интернет		
4. Параллельные вычисления.		
5. Новые жанры. Неткасты, вебинары, видеоконференции и блоги. Коллективные методы работы в сети Интернет.		

### IV. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

#### РАССЧЕТ БАЛЛОВ

**ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Компьютерные технологии в науке и образовании»  
1 модуль**

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.1	Тесты - 6	6 баллов (тест содержит 10 вопросов, 0.1 балл за 1 правильный ответ)
2	ОПК-3.2 ОПК-3.3	Коллоквиум №1	15 баллов (коллоквиум включает обсуждение ответов за тест – 7.5 баллов, решение 10 задач – 7.5 баллов)
3		Выполнение домашней работы	4
4		Посещаемость	1
5		Работа на занятии	4
		<b>Итого:</b>	<b>30</b>

**2 модуль**

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-3.1	Тесты - 4	6 баллов (тест содержит 10 вопросов, 0.15 баллов за 1 правильный ответ)
2	ОПК-3.2 ОПК-3.3	Коллоквиум №2	15 баллов (коллоквиум включает обсуждение ответов за тест – 7.5 баллов, решение 10 задач – 7.5 баллов)
3		Выполнение домашней работы	4
4		Посещаемость	1
5		Работа на занятии	4
		<b>Итого:</b>	<b>30</b>
6		<b>Экзамен</b>	<b>40 (10 заданий в билете по 4 балла)</b>
		<b>Итого за семестр</b>	<b>100 баллов</b>

## Текущий контроль успеваемости

### **Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы магистрантов**

Магистрантам 1го года обучения по мере прохождения курса предлагаются 20 тем для самостоятельной подготовки, по материалам которых они готовят доклады. Сложные и объёмные темы магистранты могут подготавливать вдвоем. На обсуждение группой выносятся доклады вместе с экранной презентацией. Презентация в условиях локальной сети транслируется на компьютеры компьютерного класса. Оценка зачетного контроля (2 зачетных единицы в каждом семестре) выставляется после обсуждения в группе.

Магистранты 2го года обучения уже имеют темы магистерских выпускных работ – диссертаций. Зачётный контроль состоит в оценке А) материалов литературного обзора по теме и Б) экранной презентации доклада выпускной работы

Особенностью контроля является его рецензионный характер. Оцениваемые материалы в виде файлов находятся в работе в среде Windows Live Office, что позволяет своевременно, в режиме on-line контролировать самостоятельную работу обучающегося. Оцениваются полнота, новизна и релевантность найденных материалов, качество библиографического описания. Обращается повышенное внимание на полноту использования международных научных источников, в основном, на английском языке. Презентация должна в полной мере отражать химическую специфику работы.

### **V. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины:**

#### **1. Рекомендуемая литература**

Состоит в предоставлении магистрантам работающих версий программного обеспечения, как локальных, так и удалённых. Техническая база факультета соответствует современным требованиям. Вся используемая литература предоставляется в виде раздаточного материала на электронном носителе, либо постоянно доступна в сети Интернет.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

##### **а) основная литература:**

1. Онокой Л.С., Титов В.М. Компьютерные технологии в науке и образовании // Серия «Высшее образование», Изд. «Форум, Инфра-М». 2014. 224 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=241862>

2. Майстренко А.В., Майстренко Н.В. Информационные технологии в науке, образовании и инженерной практике // Учебное пособие. Изд. ТГТУ, Тамбов. 2009. 96 с.
3. Кручинин В.В., Тановицкий Ю.Н., Хомич С.Л. Компьютерные технологии в науке, образовании и производстве электронной техники // Учебное пособие. Изд. ТГУ, Томск. 2012. 155 с.
4. Шишов О.В. Современные технологии и технические средства информатизации // Учебник. М.: Изд. НИЦ Инфра-М, 2012. 462 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=263337>
5. Безручко В.Т. Компьютерный практикум по курсу "Информатика" // Учебное пособие. 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Изд. ФОРУМ: ИНФРА-М, 2012. 368 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=332293>
6. Мишин И.Н. Компьютерные технологии в научных исследованиях // Учебное пособие для аспирантов. Смоленск, ФГБОУ ВПО «Смоленская ГСХА». 2015. 148 с. <http://www.sgsha.ru/sgsha/biblioteka/Posobie%20kop%20tehnolog%20v%20naychn%20isledovaniyah.pdf>
7. Бартенев О.В. Современный Фортран. - М.: Диалог-МИФИ, 2005
8. Финкельштейн А.В. и Птицын О.Б., Физика белка, курс лекций, Книжный дом Университет, Москва, 2002, 374 с.

**б) дополнительная литература:**

9. Литвак М.М. Использование программного пакета ChemOffice в преподавании биоорганической химии // Фундаментальные исследования. - 2008. -№4.-С. 34-38.
10. **Компьютерный пакет** программных средств ChemOffice (Ultra Version 9.0) (2005) фирмы CambridgeSoft Corporation.
11. Cloud Computing ChemBioOffice Cloud (Электронный ресурс ChemBioOffice Cloud\CambridgeSoft Cloud Computing – ChemBioOffice Cloud.mht)
12. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М: СОЛОН-Пресс, 2005. -536 с.
13. Орещенков И.В., Многопроцессорным компьютерам – параллельные программы.//Мир ПК, 2007, № 10, 50-54.
14. Justin James 10 skills developers will need in the next five years.// TechRepublic, 2009 (электронный ресурс <http://downloads.techrepublic.com.com/>)
15. Debra Littlejohn , 10 tech skills you should develop during the next five years // TechRepublic, 2007 (электронный ресурс <http://downloads.techrepublic.com.com/>)
16. Руководство (Manual.pdf) в составе пакета программ ChyperChem v.6
17. Windows Weekly with Paul Thurrott (электронный ресурс <http://twit.tv/ww/187.html>)



## 2. Программное обеспечение

### 2) Программное обеспечение

#### а) Лицензионное программное обеспечение

- Электронная образовательная среда ТВГУ  
<https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Origin Pro
- HyperChem Pro. HyperCube Inc.
- Microsoft Office

#### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Chem Office 7.0 2002
- ISIS<sup>TM</sup>/Draw 2.4 2001

### 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- [Protein Data Bank](#)

#### 4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Электронная образовательная среда ТВГУ <https://www.tversu.ru/informatisation/>

Техническая и учебная литература on-line используемого программного обеспечения, учебные материалы и средства учета на “облачном хранилище” с общим для учебной группы доступом в режиме редактирования.

ChyperChem v.8; 2009

ChemBioOffice, 2010 с поддержкой на сайте производителя.

Ресурсы сайтов Microsoft для использования on-line пакета программ Microsoft Office Live

## VI. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

### Учебная программа

#### Раздел 1. Движущие силы развития информационных технологий

Движущие силы развития новых информационных технологий. Информационные технологии в науке. Информационные технологии в образовании. Информационные технологии в бизнесе. Информационные технологии государственных, региональных и муниципальных общественных сервисов, программа “Электронная Россия” Технологические и маркетинговые мотивы развития информационных технологий. Совместимость. Роль стандартизации программных и аппаратных средств. Российские национальные и международные стандарты.

## Раздел 2. Интернет и архитектуры компьютерных сетей.

Архитектуры клиент-сервер и клиент-“облако”. Программное обеспечение как сервис. Средства компьютерной безопасности в различных архитектурах. Понятие виртуальных машин. Sun Java и MS .Net как средства виртуализации. Современное и будущее использование сети Интернет. Протоколы сетевого транспорта и их обработка в операционных системах Unix и Windows. Версии 4 и 6 протоколов TCP/IP. Интернет для мобильных устройств. Нетбуки, планшеты, смартфоны, коммуникаторы. Операционные системы, браузеры и офисные средства для них. Интеграция мобильных устройств в корпоративные сети.

## Раздел 3. Поисковые средства сети Интернет

Понятие простого и расширенного поиска. Ключевые слова и фразы для поиска.

Алгоритмы поиска. Поиск и национальные языки. Поисковые машины и порталы. Google, Bing, Yandex, Rambler и другие. Многопоисковые машины (осуществляющие Multiple Search). Специализированные химические каталоги, сайты, базы данных и электронные библиотеки в сети. Приемы сохранения полученной из сети информации.

## Раздел 4. Параллельные вычисления.

Параллельные вычисления. Многопроцессорные компьютеры, суперкомпьютеры и кластеры. Параллельные программы. Процессы и нити как средство разветвления программ внутри процесса. Взаимодействие нитей, синхронизация, семафоры и мьютексы. Способы обмена данными между процессами. Модель интерфейса передачи сообщений MPI и её реализация в программах на языках Си/C++ и Фортран и её свободно доступная реализация MPI C Namelion. Специализированные суперкомпьютерные центры в области расчётных методов химии, коллективные центры обработки данных.

## Раздел 5. Новые виды. Неткасты, вебинары, видеоконференции и блоги.

Мультимедийные компоненты учебных средств и средств общения в сети. Понятие цифрового кодирования. Форматы мультимедийных файлов и программы кодеки. Форумы и блоги. Windows live Essentials 2011 как среда реализации. Экономические предпосылки использования новых мультимедийных жанров. Интерактивность.

Практические примеры из областей химии и информационных технологий: ChemDraw Live Webinar – вебинар фирмы CambridgeSoft для разработчиков, пользователей и учащихся; Неткаст еженедельника по ОС Windows и приложениям для неё Windows Weekly; российский вебинар на тему “Комплексное управление документооборотом в ВУЗе” Корпорации “Галактика”

Старые жанры в сети-энциклопедии Википедия и Енкарта. Образование и самообразование в сети Интернет. Коллективная работа в сети Интернет

Windows Live Office. Open Office и другие альтернативные средства работы с документами.

## **VII. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

- Электронная образовательная среда ТВГУ  
<https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Университетский центр Интернет.
- Компьютерная класс с 10 объединенными в сеть компьютерами со средствами мультимедиа с выделенным сервером.
- Компьютерный класс из 10 компьютеров Core 4 Quadro с ОС Windows 10 или Linux (опционально) в составе университетской VPN сети.
- Интернет с каналом 3 Kbps у конечного пользователя

## **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			