

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 17.11.2023 12:40:04
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Никольский В.М.

27 июня 2023 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

Составители: к.х.н., доцент, Межеумов И.Н.
к.ф.-м.н., ст. преподаватель Малышев М.Д.

Тверь, 2023 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 трём специализациям химико-технологического факультета – аналитическая, органическая и физическая химия. 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: 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:

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 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.
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля; ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности. ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

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		
Движущие силы развития информационных технологий	28	3	3	17	5
Интернет и архитектуры компьютерных сетей	28	3	3	17	5
Поисковые средства сети Интернет	28	3	3	17	5
Параллельные вычисления	28	3	3	17	5
Методы компьютерного моделирования	32	3	3	19	7
ИТОГО	144	15	15	87	27

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Движущие силы развития информационных технологий 2. Интернет и архитектуры компьютерных сетей 3. Поисковые средства сети Интернет 4. Параллельные вычисления 5. Методы компьютерного моделирования	<ul style="list-style-type: none"> лекция, практические занятия в компьютерном классе 	<ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), цифровые (показ презентаций) Совместная работа над документами и проведения совместного поиска в сети-занятия в режиме online Удаленные видеоконференции по материалам курса в режиме online

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

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

Магистрантам 1-го года обучения по мере прохождения курса предлагаются 20 тем для самостоятельной подготовки, по материалам которых они готовят доклады. Сложные и объемные 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 2-го 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 многофункционального редактора ONLYOFFICE, 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.

а) Основная литература:

1. Онокой, Л. С. Компьютерные технологии в науке и образовании : учебное пособие / Л. С. Онокой, В. М. Титов. - Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2019. - 224 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-8199-0469-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1002715> (дата обращения: 07.11.2023). – Режим доступа: по подписке.

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 / О.В. Шишов. — Москва : ИНФРА-М, 2024. — 462 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс]. — (Высшее образование). - ISBN 978-5-16-019029-7. - Текст : электронный. - URL:

<https://znanium.com/catalog/product/1891958> (дата обращения: 07.11.2023). – Режим доступа: по подписке.

5. Безручко, В. Т. Компьютерный практикум по курсу «Информатика» : учебное пособие / В.Т. Безручко. — 3-е изд., перераб. и доп. — Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2022. — 368 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс]. — (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-8199-0714-6. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1832387> (дата обращения: 07.11.2023). – Режим доступа: по подписке.

6. Бартенев О.В. Современный Фортран. - М.: Диалог-МИФИ, 2005

7. Финкельштейн А.В. и Птицын О.Б., Физика белка, курс лекций, Книжный дом Университет, Москва, 2002, 374 с.

8. Математическое и компьютерное моделирование [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. Н. Бугров [и др.]. - Дубна : Государственный университет «Дубна», 2019. - 71 с. –Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/154489>

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. Руководство (Manual.pdf) в составе пакета программ ChyperChem v.6

2) Программное обеспечение

Google Chrome бесплатное ПО

Яндекс Браузер бесплатное ПО

Kaspersky Endpoint Security 10 акт на передачу прав ПК545 от 16.12.2022

Многофункциональный редактор ONLYOFFICE бесплатное ПО

ОС Linux Ubuntu бесплатное ПО

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

● [Protein Data Bank](#)

● <https://biblioclub.ru>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины
Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>.
Облачные сервисы: <https://cloud.tversu.ru/login>

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 C/C++ и Фортран и её свободно доступная реализация MPI

С Hamelion. Специализированные суперкомпьютерные центры в области расчётных методов химии, коллективные центры обработки данных.

Раздел 5. Методы компьютерного моделирования

Классификация пространственно-временных масштабов моделирования. Метод молекулярной динамики. Метод Монте-Карло. Моделирование различных ансамблей. Мезомасштабные подходы моделирования материалов. Метод диссипативной динамики частиц. Метод броуновской динамики. Ланжевеновская динамика. Мультимасштабное моделирование. Гибридные расчетные схемы. Оптимизация и ускорение вычислений.

VII. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс

Мультимедийная аудитория

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№ п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.			
2.			