

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович
Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности
Дата подписания: 23.06.2026 16:00:02
Уникальный программный ключ:
aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия
АХ 2025.plx

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



УТВЕРЖДАЮ
Руководитель ООП

Никольский В.М.

"14" мая 2025 г.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные технологии в науке и образовании

Закреплена за кафедрой:	Физической химии
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль):	Аналитическая химия
Квалификация:	Магистр
Форма обучения:	очная
Семестр:	1,2

Программу составил(и):

д-р хим. наук, проф., Виноградова Марина Геннадьевна

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

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.

Задачи :

- 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

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Физико-химические расчеты

Инновационные технологии в обучении химии

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Молекулярное моделирование

Актуальные задачи современной химии. Часть 1.

Актуальные задачи современной химии. Часть 2.

Управление научно-проектной деятельностью

Научно-исследовательская работа

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану	144
в том числе:	
самостоятельная работа	87
часов на контроль	27

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

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-3.1: Использует современные IT-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. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	2
зачеты	1

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
	Раздел 1. Движущие силы развития информационных технологий				
1.1	Движущие силы развития новых информационных технологий. Информационные технологии в науке. Информационные технологии в образовании. Информационные технологии в бизнесе.	Лек	1	3	
1.2	Технологические и маркетинговые мотивы развития информационных технологий. Совместимость. Роль стандартизации программных и аппаратных средств.	Пр	2	3	
1.3	Российские национальные и международные стандарты.	Ср	1	17	
	Раздел 2. Интернет и архитектуры компьютерных сетей.				
2.1	Архитектуры клиент-сервер и клиент-«облако». Программное обеспечение как сервис. Средства компьютерной безопасности в различных архитектурах.	Лек	1	3	

2.2	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.	Пр	2	3	
2.3	Интернет для мобильных устройств. Нетбуки, планшеты, смартфоны, коммуникаторы. Операционные системы, браузеры и офисные средства для них. Интеграция мобильных устройств в корпоративные сети.	Ср	1	23	
	Раздел 3. Поисковые средства сети Интернет				
3.1	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.	Лек	1	3	
3.2	Специализированные химические каталоги, сайты, базы данных и электронные библиотеки в сети.	Пр	2	3	
3.3	Многопоисковые машины (осуществляющие Multiple Search). Приемы сохранения полученной из сети информации.	Ср	2	11	
	Раздел 4. Параллельные вычисления.				
4.1	Параллельные вычисления. Многопроцессорные компьютеры, суперкомпьютеры и кластеры. Параллельные программы. Процессы и нити как средство разветвления программ внутри процесса. Взаимодействие нитей, синхронизация, семафоры и мьютексы	Лек	1	3	
4.2	Специализированные суперкомпьютерные центры в области расчётных методов химии, коллективные центры обработки данных.	Пр	2	3	
4.3	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 Hamelion.	Ср	1	17	
	Раздел 5. Новые виды. Неткасты, вебинары, видеоконференции и блоги.				
5.1	Мультимедийные компоненты учебных средств и средств общения в сети. Понятие цифрового кодирования.	Лек	1	3	
5.2	Форматы мультимедийных файлов и программы кодеки. Форумы и блоги.	Пр	2	3	

5.3	Экономические предпосылки использования новых мультимедийных жанров. Интерактивность.	Ср	2	19	
-----	---	----	---	----	--

Образовательные технологии

Для реализации ООП и повышения качества образовательного процесса используются следующие образовательные технологии:

Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
2	Активное слушание
3	Методы группового решения творческих задач (метод Дельфи, метод 6–6, метод развивающей кооперации, мозговой штурм (метод генерации идей), нетворкинг и т.д.)
4	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

представлены в приложении 1.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

представлены в приложении 1.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

представлены в приложении 1. Шкала и критерии выставления оценок описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ).

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Рекомендуемая литература

Основная

Шифр	Литература
Л.1.1	Трофимов, Ильина, Кияев, Трофимова, Информационные технологии, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-18340-5, URL: https://urait.ru/bcode/534808
Л.1.2	Трофимов, Ильина, Кияев, Трофимова, Информационные технологии, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-18341-2, URL: https://urait.ru/bcode/534809
Л.1.3	Мойзес, Кузьменко, Информатика. Углубленный курс, Москва: Юрайт, 2023, ISBN: 978-5-534-07980-7, URL: https://urait.ru/bcode/516858

Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	OpenOffice

5	Mathcad 15 M010
6	MATLAB R2012b
7	Origin 8.1 Sr2
8	HyperChem

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	СПС "КонсультантПлюс"
2	ЭБС «ЮРАИТ»
3	ЭБС ТвГУ
4	ЭБС «Лань»
5	ЭБС BOOK.ru
6	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
7	Репозиторий ТвГУ
8	СПС "ГАРАНТ"
9	Патентная база компании QUESTEL- ORBIT

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ 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.

В ходе самостоятельной работы студенты проводят поиск по заданной тематике, анализируют статьи, материалы различных сайтов, видеоконференций, вебинаров и представляют результаты в виде презентации. Поиск и анализ статей осуществляется в базах данных GOOGLE. Осуществляется работа с русскими и английскими статьями.

Изучая дисциплину, необходимо добиться полного усвоения ее теоретических основ, научиться применять теоретические знания для решения практических задач. Содержание незнакомых терминов, встретившихся в процессе освоения учебного материала, можно выяснить при помощи справочной литературы. Более сложные вопросы уточняются на консультациях с преподавателем кафедры.

Следует четко знать определения, принципы, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.

Магистрантам 1го 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 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.

Зачет и экзамен по дисциплине включают:

- устный ответ на зачетный вопрос или выполнение тестового задания;
- результаты рейтинг-контроля.

При оценке устного ответа принимается во внимание:

- 1) полнота, глубина освещения вопроса, логика и аргументированность изложения материала;
- 2) умение связывать теорию с практикой, применять полученные знания для анализа будущей деятельности;
- 3) умение иллюстрировать теоретические положения примерами;
- 4) культура речи.

В ходе зачета и экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.