

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 10.03.2024 12:16:00
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b46c23d1b675108

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

Утверждаю:

Руководитель ООП

Ворончихина Л.И.

27 мая 2024



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:

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...	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		
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
Новые жанры. Неткасты, вебинары, видеоконференции и блоги. Коллективные методы работы в сети Интернет.	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	<ul style="list-style-type: none"> • лекция, • практические занятия в компьютерном классе, • проверка домашних заданий • занятия в режиме on-line 	<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 on-line • Удаленные видеоконференции по материалам курса в режиме on-line
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
		Итого:	30

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
		Итого:	30
6		Экзамен	40 (10 заданий в билете по 4 балла)
		Итого за семестр	100 баллов

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%20onaychn%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
- ISISTM/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.			