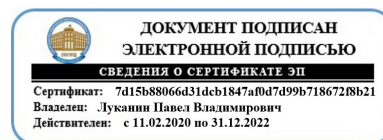


УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТЭ



Рабочая программа дисциплины

Б1.О.08

Компьютерные технологии в науке и образовании

Учебный план: ФГОС3++m290403-1_19-12.plx

Кафедра: **12** Органической химии

Направление подготовки:
(специальность) 29.04.03 Технология полиграфического и упаковочного производства

Профиль подготовки:
(специализация) Технология тароупаковочных материалов

Уровень образования: магистратура

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа Практ. занятия	Сам. работа	Контроль, час.	Трудовая мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
2	УП	34	20,75	17,25	2	Зачет
	РПД	34	20,75	17,25	2	
Итого	УП	34	20,75	17,25	2	
	РПД	34	20,75	17,25	2	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 29.04.03 Технология полиграфического и упаковочного производства, утверждённым приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22.09.2017 г. № 967

Составитель (и):

Кандидат химических наук, доцент

Курзин А.В.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Аким Э.Л.

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области компьютерных технологий, используемых в теоретической химии, химической технологии, в также в химическом образовании.

1.2 Задачи дисциплины:

- Сформировать представления о современном уровне развития вычислительной техники и ее применении в различных областях химической науки, технологии и образования.
- Рассмотреть современные виды информационных технологий, связанные с развитием компьютерных технологий и методов исследований, основанных на использовании современных вычислительных машин.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Математическое моделирование

Экономический анализ и управление производством

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-4: Способен участвовать в разработке прикладных программ при решении задач проектирования изделий полиграфического и упаковочного производства, технологических процессов их изготовления

Знать: методы и средства информатизации интеллектуальной деятельности

Уметь: выбирать инструментарий компьютерных технологий для решения задач в профессиональной и научной деятельности

Владеть: навыками использования методов и приемов решения задач науки и образования с применением компьютерных технологий

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контакт ная работа	СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Пр. (часы)			
Раздел 1. Компьютерные технологии в естествознании	2				О
Тема 1. История вычислительной техники История вычислительной техники. Основные типы компьютеров: персональные компьютеры, супер ЭВМ, рабочие станции, компьютеры Apple, ноутбуки, карманные компьютеры (планшеты), смартфоны и коммуникаторы. Вычислительные сети: локальные, региональные, мировые, Интернет.		4	2	ГД	

Тема 2. Программы для оформления результатов научной работы Компьютерные программы для генерации первичных документов и обеспечения большей эффективности и экономии времени научного исследования. Концепция рабочего места учёного (scientific workplace). Программы для оформления результатов научной работы и визуализации экспериментальных данных в виде графиков, гистограмм, диаграмм и т.д. Программы, используемые для верстки в научных издательствах (коммерческие и бесплатные): LaTeX. Adobe Acrobat, Scribus. Продукты фирмы Microsoft: текстовый редактор Word, электронные таблицы Excel, программа для создания презентаций PowerPoint. Open-source аналоги: Open Office, LibreOffice и др. Программы для составления библиографических списков. Возможности программ Endnote, Mendeley и др. Программы для математических расчетов: Maple, MathCad, Mathematica. Универсальные статистические программы SPSS и STATISTICA. Программы для построения графиков: Origin, Grapher. Специализированные химические пакеты: ISIS, ChemOffice, ACD Labs.		4	2	ИЛ	
Раздел 2. Компьютерные технологии в химии и технологии					
Тема 3. Компьютеры и программы для решения химических задач Компьютеры и программы для решения химических задач. Задачи, требующие большой вычислительной мощности: квантово-химические расчеты, построение моделей реакций и растворов. Задачи, не требующие высокой вычислительной мощности: отображение экспериментальных данных с их последующей обработкой. Автоматизация рутинных процедур. Сопряжение приборов и ЭВМ.		4	2	ГД	О
Тема 4. Применение компьютеров в органическом синтезе Применение компьютеров в органическом синтезе. Ретросинтетический анализ. Планирование синтеза. Три основных аспекта компьютерного синтеза: представление и анализ химических структур, представление и анализ химических реакций-трансформаций, критерии отбора. Программы SYNGEN, EROS, SYNCHEM, LHASA, TOSCA и др.		4	3	ИЛ	

Тема 5. Применение компьютеров в физической химии Программы расчета термодинамических характеристик (CHET, Termocalc). Расчет структуры и энергии молекул. Расчеты по методу Хюккеля и его модификациям. Расчеты методами молекулярной механики. Полуэмпирические методы расчета. Программы расчета характеристик молекул (HyperChem, Dalton, Морас, GAMESS), кинетических параметров (KINET, Kintecus, Polyrate). Программы расчета межфазового равновесия: ASPEN, PROII и др.		4	3	ИЛ	
Тема 6. Применение компьютеров в аналитической химии Применение компьютеров в аналитической химии. Автоматическое титрование. Функциональный и элементный анализ. Оптическая спектроскопия. ЯМР-спектроскопия (NUTS и другие программы обработки ЯМР-спектров). Хроматография (Цвет-Аналитик, Мультихром, Хром-Аналит и др.). Рентгеноструктурный анализ (Ortep3).		2	2	ИЛ	
Тема 7. Использование компьютеров в химической технологии Конструирование и разработка математических моделей процессов. Специальные интерфейсы для химической технологии. Экспертная система компьютерного моделирования, оптимизации и экономической оценки статических и динамических режимов химико-технологических процессов и систем на основе программного комплекса ASPENPLUS. Графическая визуализация вычислений в химической технологии. Расчет технологических процессов на основе физико-химических параметров, расчет материального и теплового балансов (программный комплекс HYSIS). Расчет оборудования, подбор из типового набора (ChemCAD). Компьютерное моделирование аварийных ситуаций STOA.		4	2,25	ИЛ	
Раздел 3. Применение компьютерных технологий для поиска информации и получения образования					О

Тема 8. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet. Специализированные метасайты и поисковые машины. Постановка задачи поиска и формулирование запроса. Платный и бесплатный доступ к информации. Основные принципы построения научных баз данных. Обработка баз данных, поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях. Серверные базы данных. Построение форм запросов, методы сортировки. Принципы организации баз научных и справочных данных. Банк термодинамических данных NIST, банк данных по органическим реакциям orgsyn.com, рекомендации IUPAC, информационные возможности ChemWeb, Scirus.com. Базы данных для библиометрического анализа; специализированные и междисциплинарные базы данных; особенности баз данных Института научной информации (ISI). Особенности базы данных National Science Indicators, примеры анализа количественных показателей исследовательской активности в разных странах мира; понятие "impact"; сопоставительный анализ библиометрических показателей, отражающий уровень развития научных исследований в различных странах и различных предметных областях. Научные электронные издания. Сайты издательств. Материалы конференций. Электронные библиотеки. Патентные базы (IBM, USPTO, espacenet). Специализированные библиографические поисковые машины (WPINDEX, STN). Поиск химической информации (Beilstein Commander, SciFinder).		4	2,25	ИЛ	
--	--	---	------	----	--

Тема 9. Использование компьютеров в получении высшего и постдипломного образования Справочные программы. Средства дистанционного обучения. Научно-методические основы и инструментальные средства создания электронных учебных пособий. Язык разметки HTML. Виды материалов, необходимых для дистанционного обучения. Системы массового онлайн-обучения: Coursera, Edx, Academic Earth и др. Компьютерные обучающие системы и их виды. Обучающие программы для школы и отдельных химических дисциплин высшего образования. Контролирующие и тестовые программы. Тренажеры. Компьютерное моделирование в обучении. Программы проблемного подхода. Экспертные системы и искусственный интеллект. Программы специального назначения для преподавателя (LMS42, Moodle и т.п.). Разработка обучающих программ. Проблемы и перспективы. Мультимедиа в обучении химии. Примеры программного обеспечения.		4	2,25	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		34	20,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		17,25			
Всего контактная работа и СР по дисциплине		51,25	20,75		

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-4	1. Правильно называет методы и средства информатизации интеллектуальной деятельности, принципы и особенности современных программ автоматизированного проектирования и математического моделирования химико-технологических систем. 2. Выбирает инструментальный компьютерных технологий для решения задач в профессиональной и научной деятельности: современные методы и средства планирования и организации исследований и разработок, проведения экспериментов и наблюдений, обобщения и обработки информации с применением электронно-вычислительной техники. 3. Демонстрирует навыки использования методов и приемов решения задач с применением компьютерных технологий на различных этапах: постановки задачи, сбора информации, организации и проведения исследования, анализе полученных данных.	1. Вопросы устного собеседования 2. Практико-ориентированные задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает достаточный уровень знаний современных	Способен предложить пути решения задач, поставленных преподавателем, на основе

	компьютерных технологий, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой; проявляет творческие способности в использовании учебного материала.	полученных знаний и оценить их эффективность. Может грамотно и ясно изложить свои знания в письменной форме.
Не зачтено	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; не владеет современными компьютерными технологиями для решения задач науки и образования; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе на зачете существенные ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя.	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; не владеет современными компьютерными технологиями для решения задач науки и образования; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе на зачете существенные ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя; не способен внятно устно преподнести информацию, изложенную письменно.

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 2	
1	Основные этапы развития информационных технологий. Информационное общество.
2	Взаимосвязь понятий «данные», «информация», «знание». Способы хранения и передачи информации.
3	Этапы развития вычислительной техники и компьютерных технологий.
4	Вычислительные сети: локальные, региональные, мировые, Интернет.
5	Концепция рабочего места учёного (scientific workplace).
6	Офисные пакеты. Сравнение функциональных возможностей отдельных программ и пакетов в целом на примере Microsoft Office, Open Office, LibreOffice и др.
7	Программы для математических расчетов: Maple, MathCad, Mathematica.
8	Программы для построения графиков: Origin, Grapher, Microsoft Excel. Достоинства и недостатки.
9	Возможности программ для составления библиографических списков: Endnote, Mendeley, JabRef.
10	Программы, используемые для верстки в научных издательствах: LaTeX. Adobe Acrobat, Scribus.
11	Специализированные химические пакеты: ISIS, ChemOffice, ACD Labs.
12	Квантово-химические расчеты, построение моделей реакций и растворов.
13	Отображение экспериментальных данных с их последующей обработкой. Автоматизация рутинных процедур.
14	Применение компьютеров в органическом синтезе. Ретросинтетический анализ. Планирование синтеза.
15	Три основных аспекта компьютерного синтеза: представление и анализ химических структур, представление и анализ химических реакций-трансформаций, критерии отбора.
16	Расчет структуры и энергии молекул. Расчеты по методу Хюккеля и его модификациям. Расчеты методами молекулярной механики. Полуэмпирические методы расчета.
17	Программы расчета характеристик молекул, кинетических параметров, межфазового равновесия.
18	Применение компьютеров в аналитической химии. Автоматическое титрование. Функциональный и элементный анализ. Оптическая спектроскопия, ЯМР-спектроскопия, хроматография, рентгеноструктурный анализ.
19	Конструирование и разработка математических моделей химико-технологических процессов. Специальные интерфейсы для химической технологии.
20	Экспертная система компьютерного моделирования, оптимизации и экономической оценки статических и динамических режимов химико-технологических процессов и систем на основе программного комплекса ASPENPLUS.
21	Расчет технологических процессов на основе физико-химических параметров, расчет материального и теплового балансов.
22	Расчет оборудования, подбор из типового набора.
23	Компьютерное моделирование аварийных ситуаций STOA.
24	Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet. Специализированные метасайты и поисковые машины. Постановка задачи поиска и формулирование запроса.

25	Основные принципы построения научных баз данных. Обработка баз данных, поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях. Серверные базы данных. Построение форм запросов, методы сортировки.
26	Принципы организации баз научных и справочных данных. Банк термодинамических данных NIST, банк данных по органическим реакциям orgsyn.com, рекомендации IUPAC.
27	Информационные возможности ChemWeb, SciFinder, Scirus.com.
28	Базы данных для библиометрического анализа; специализированные и междисциплинарные базы данных; особенности баз данных Института научной информации (ISI).
29	Примеры анализа количественных показателей исследовательской активности в разных странах мира; понятие "impact"; сопоставительный анализ библиометрических показателей, отражающий уровень развития научных исследований в различных странах и различных предметных областях.
30	Научные электронные издания. Сайты издательств. Материалы конференций.
31	Электронные библиотеки. Патентные базы (IBM, USPTO, espacenet). Специализированные библиографические поисковые машины (WPINDEX, STN). Поиск химической информации (Beilstein Commander, SciFinder).
32	Средства дистанционного обучения. Научно-методические основы и инструментальные средства создания электронных учебных пособий. Виды материалов, необходимых для дистанционного обучения.
33	Системы массового онлайн-обучения: Coursera, Edx, Academic Earth и др.
34	Компьютерные обучающие системы и их виды. Обучающие программы для школы и отдельных химических дисциплин высшего образования.
35	Контролирующие и тестовые программы. Тренажеры. Компьютерное моделирование в обучении. Программы проблемного подхода. Экспертные системы и искусственный интеллект.
36	Программы специального назначения для преподавателя (LMS42, Moodle и т.п.). Разработка обучающих программ. Проблемы и перспективы. Мультимедиа в обучении химии.

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено.

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы) находятся в Приложении к данному РГД.

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

☒

Письменная

☒

Компьютерное тестирование

Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

- Возможность пользоваться справочными таблицами, калькулятором;
- В том случае, если ответ требует выхода в сеть Интернет для демонстрации навыков обучающегося, такой выход может быть предоставлен.
- Время на подготовку ответа 40 минут, время ответа не более 10 минут.
- Письменный конспект подготовки может быть использован при обязательном устном собеседовании

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Днепровская Н. В., Комлева Н. В.	Открытые образовательные ресурсы	Москва: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Ай Пи Эр Медиа	2019	http://www.iprbookshop.ru/79713.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				

Изюмов А. А., Коцубинский В. П.	Компьютерные технологии в науке и образовании	Томск: Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Эль Контент	2012	http://www.iprbookshop.ru/13885.html
А.В. Курзин, Л.М. Попова, А.Н. Евдокимов	Химические реакторы [Текст] : учеб. пособие	М-во образования РФ, СПбГТУРП. – СПб.: СПбГТУРП	2014	http://nizrp.narod.ru/metod/kaforgchem/3.pdf

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Курс «Информационные технологии в химии» [Электронный ресурс]: URL: <http://www.abc.chemistry.bsu.by>
2. База данных по патентам [Электронный ресурс]: URL: <http://www.ep.espacenet.com>
3. Лекции по дисциплине «Компьютерные технологии в науке и образовании» [Электронный ресурс]: URL: <http://chaliev.ru/ise/lections-comp-tech-zo.php>
4. Сайт химического факультета Московского государственного университета [Электронный ресурс]: URL: <http://www.chemnet.ru>

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8
MicrosoftOfficeProfessional 2013

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

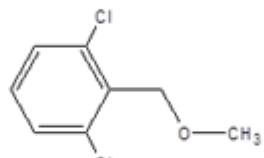
Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду

Приложение

рабочей программы дисциплины ____ Компьютерные технологии в науке и образовании ____
наименование дисциплины

по направлению подготовки 29.04.03 Технология полиграфического и упаковочного производства
наименование ОП (профиля): Технология тароупаковочных материалов

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

№ п/п		Условия типовых практико-ориентированных заданий (задач, кейсов)	
Семестр 2			
1	№ п/п	Условия типовых заданий	Ответ
	1	Провести поиск вещества 2,6-Dichlorobenzyl methyl ether в базе данных NIST.	Formula: C₈H₈Cl₂O Molecular weight: 191.055 IUPAC Standard InChI: InChI=1S/C₈H₈Cl₂O/c1-11-5-6-7(9)3-2-4-8(6)10/h2-4H,5H2,1H3 IUPAC Standard InChIKey: QBKBHXLQAMKOB-UHFFFAOYSA-N CAS Registry Number: 33486-90-7 Chemical structure:  This structure is also available as a 2d Mol file. Other names: Benzene, 1,3-dichloro-2-(methoxymethyl)-; 1,3-Dichloro-2-(methoxymethyl)benzene Приводятся также термодинамические данные, ИК и масс-спектры, данные по газожидкостной хроматографии
	2	Провести поиск в реферативной базе данных SCOPUS по автору Evdokimov, Andrey N.	St. Petersburg State Technological University of Plant Polymers, Saint Petersburg (ex Leningrad), Russian Federation Author ID: 7006217216 Documents:22 Citations:80 total citations by 54 documents h-index: 6 Co-authors:16 (данные представлены на 13.01.2017)
	3	Привести список курсов по химии (с указанием университетов, ведущих обучение) на платформе массового онлайн обучения Coursera.	Chemistry Кентуккийский университет The Science of Gastronomy Гонконгский университет науки и технологий Creativity, Innovation, and Change Университет штата Пенсильвания Introduction to Chemistry: Reactions and Ratios Университет Дьюка ¿Cómo?! ¿Química en mi casa? Национальный автономный университет Мексики (данные приведены частично, представлены на 13.01.2017)
	4	Как можно очистить экран в программе ChemSketch?	– Из меню File выбрать строку New. Эта операция откроет новый пустой документ; – Через меню Edit выбрать строку Select All и затем в этом же меню щелкнуть Delete; – Нажать на клавиатуре Ctrl+A для того чтобы выбрать все объекты на странице и затем нажать кнопку Delete;  – На тавной панели инструментов выберите Delete. Щелкнуть по пустому месту, на котором нет нарисованных структур, для того чтобы все выделить, и затем щелкнуть по любому рисунку для того, чтобы очистить все рабочее пространство.