

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«31» мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Информатика

Уровень высшего образования:

Бакалавриат

Направление подготовки (специальность):

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:

«Общая химия»

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №2 от 14.05.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с ФГОС ВО для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.03.01 «Химия» (программа бакалавриата), утвержденного приказом Минобрнауки от 17 июля 2017 г. №671.

Год (годы) приема на обучение 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ОПОП

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3.Б Способен применять расчётно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.Б.2 Проводит обработку данных с использованием современной вычислительной техники	Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.); Получить: опыт использования ЭВМ для научных расчетов, моделирования и коммуникаций
ОПК-5.Б Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-5.Б.1 Использует стандартные программные средства и информационные системы для сбора, анализа и представления данных	Знать: основные сведения об архитектуре и принципах работы информационных систем и компьютерных сетей; Знать: базовые принципы устройства и функционирования ЭВМ, а также способы их применения в различных областях человеческой деятельности Знать: основные методы организации работы программных средств удаленного коллективного доступа; Знать: основные методы обеспечения информационной безопасности Знать: основные базы данных химического профиля Уметь: формализовывать описания алгоритмов Уметь: составлять простейшие вычислительные программы Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации химического содержания Владеть: навыками использования наиболее распространенного прикладного программного обеспечения Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных химического профиля

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 80 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 4 часа - групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 64 часа составляет самостоятельная работа студента

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Владеть: базовыми навыками работы с компьютерами

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Информационные технологии		16					16			2
Тема 2. Практическое использование прикладных программ		18	18	2			38			18
Тема 3. Основы программирования на языке высокого уровня и численные методы		2	18	2			22			12
Промежуточная аттестация <i>зачет, экзамен</i>	36					4	4			32

Итого	144	36	36	4		4	80			64
--------------	------------	-----------	-----------	----------	--	----------	-----------	--	--	-----------

6. Образовательные технологии:

Обучение ведется по авторским методикам. В течение всего срока обучения интенсивно используются компьютерные средства обучения и общения студентов с преподавателем. Применяются средства дистанционного обучения и сопровождения учебного процесса.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение

Электронные документы. Подготовка документов в среде Microsoft Word. Теоретическая подготовка.

Электронные таблицы. Представление данных и вычисления в среде Microsoft Excel. Теоретическая подготовка.

Знакомство со средой Microsoft Visual Basic. Линейные вычисления. Числовые типы значений. Ошибка вычислений. Теоретическая подготовка.

Вычисление с применением циклов. Суммирование рядов. Методы численного интегрирования. Численные методы решения нелинейных уравнений. Линейная регрессия. Теоретическая подготовка.

Вычисления с применением функций. Приближенное решение системы дифференциальных уравнений. Теоретическая подготовка.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. О.Б. Калугина, В.С. Люцарев. Работа с текстовой информацией. Microsoft Office Word 2003. – М.: Интернет-Ун-т Информ. Технологий, 2005.
2. В.С. Люцарев, О.Б. Калугина. Основы программирования на Visual Basic. Теория и практика. - М.: Множительная лаборатория Химического факультета МГУ, 2008.
3. В.С. Люцарев, О.Б. Калугина. Численные методы. Практикум программирования - М.: Множительная лаборатория Химического факультета МГУ, 2008. Интернет-ресурсы

Методические указания к практическим занятиям

1. В.С. Люцарев, О.Б. Калугина. Численные методы. Практикум программирования - М.: Множительная лаборатория Химического факультета МГУ, 2008.

Дополнительная литература

1. О.Б. Калугина, В.С. Люцарев. Работа с электронными таблицами. Microsoft Office Excel 2003. - М.: Интернет-Ун-т Информ. Технологий, 2006.

Программное обеспечение современных информационных компьютерных технологий

1. Microsoft Windows
2. Microsoft Office
3. Microsoft Visual Basic Express edition

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: К.х.н., доцент Ермаков Кирилл Владимирович, межкафедральная лаборатория вычислительных методов в химии, ekv@comp.chem.msu.su, +7(495)939-2688

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы текущего контроля

Теоретические вопросы

- 1) Каковы основные компоненты Фон-Неймановского компьютера и их взаимодействие?
- 2) Каким образом осуществляется кодирование текстовой информации?
- 3) В чем разница между числами, представленными в типе Integer и типе Double?

Практические контрольные задания

Задача 1.

Для уксусной кислоты ($AcOH$) получены следующие значения аналитических концентраций в органической c_{ω} и водной c_s фазах при температуре 297,23 °C.

c_{ω} , моль/л	c_s , моль/л
0,2291	0,00303
0,4328	0,00776
0,6661	0,01551
0,8855	0,02480
1,0900	0,03586

Методом линейной регрессии вычислите константы распределения уксусной кислоты между бензолом и водой

$$K_1 = \frac{[AcOH]_s}{[AcOH]_{\omega}}$$

и димеризации $AcOH$ в бензоле

$$K_2 = \frac{[AcOH]_s^2}{[(AcOH)_2]_s}$$

по уравнению

$$\frac{c_s}{c_{\omega}} = K_1 + \frac{2K_1^2}{K_2} c_{\omega}$$

В качестве аргумента и функции используйте величины c_{ω} и $\frac{c_s}{c_{\omega}}$, соответственно.

Задача 2.

В результате рассеяния электронов на двухатомном газе получена дифракционная кривая, описываемая уравнением

$$M(s) = \frac{e^{-0,0076 \cdot s^2} \sin(2,67 \cdot s - 0,00004 \cdot s^3)}{s}$$

Требуется построить функцию плотности распределения межъядерного расстояния в молекуле по формуле

$$P(r) = \int_0^{30} M(s) \frac{\sin(sr)}{sr} ds$$

в интервале $r = 2,23,0\text{Å}$ шагом 0,05. Интегрирование произвести методом трапеций (шаг интегрирования должен быть не меньше 0,1).

Вопросы для подготовки к экзамену

Способы кодирования числовой, текстовой, графической информации.

Единицы измерения информации.

Фон-Неймановская архитектура компьютера. Адресуемая память. Однопоточный центральный процессор. Периферийные устройства.

Роль программного обеспечения компьютера. Классификация программ (системные, прикладные).

Роль операционной системы в создании абстрактного представления компьютера для прикладных задач. Распределение ресурсов компьютера между задачами и пользователями.

Основные компоненты ОС: диспетчер задач, диспетчер памяти, файловая система, подсистема безопасности

Концепции Microsoft Windows. Окна, системное меню. Работа с диалоговыми окнами: поля, списки, кнопки. Буфер обмена: его назначение и примеры использования.

Понятие текста и гипертекста, примеры. Символ, слово, строка, абзац. Языки разметки. XML и языки на его основе.

Формальные языки. Регулярные выражения. Примеры использования.

Microsoft Word. Назначение программы, использование ленты для управления ее работой. Шрифтовое оформление документа. Понятие гарнитуры и кегля. Форматирование абзацев. Списки. Работа с таблицами в тексте. Вставка объектов в текстовый документ. Редактор формул.

Microsoft Excel. Назначение программы, использование ленты для управления ее работой. Понятие электронной таблицы. Ячейки: текст, числа, формулы. Формат данных, условное форматирование.

Правила записи формул в Microsoft Excel. Относительный и абсолютный адрес. Функции по категориям, организация расчетов, ошибки вычислений.

Решение уравнений средствами Microsoft Excel. Обработка списков.

Импортирование данных в Microsoft Excel из текстовых файлов.

Построение и редактирование диаграмм в Microsoft Excel.

Основные понятия реляционной алгебры: атрибут, кортеж, отношение. Операции проекции, селекции, объединения и соединения. Использование агрегатных функций.

Локальные и глобальные компьютерные сети.

Internet, Уровни сетевого взаимодействия в TCP/IP. Протоколы прикладного, транспортного и сетевого уровней. Инкапсуляция данных.

Назначение протоколов TCP и IP. Электронная почта.

Microsoft Outlook. Назначение программы. Электронное сообщение: заголовок, содержимое, вложения. Адресная книга. Хранилище электронных сообщений: почтовый ящик, папки. Систематизация почты.

Технология клиент-сервер, протокол HTTP, информационная система World Wide Web.

Алгоритм. Языки низкого и высокого уровня. Трансляция программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем. Microsoft Visual Basic .Net Express Edition. Ввод и редактирование текста программы на языке Visual Basic. Виды ошибок и их диагностика. Ошибки трансляции и ошибки исполнения. Исполнение консольного приложения. Отладка кода, использование точек останова. Величины в языке Visual Basic. Константы и переменные. Типы величин: Integer, Double, String, Boolean. Массивы переменных. Арифметические выражения в языке Visual Basic. Порядок вычисления арифметического выражения. Использование математических функций.

Логические выражения в языке Visual Basic. Использование операций отношения и логических операций.

Операции с текстом в языке Visual Basic. Понятие объекта. Ввод/вывод текстовой информации: StreamReader и StreamWriter.

Процедуры и функции в языке Visual Basic. Формальные и фактические параметры. Передача параметров по значению и по указателю.

Локальные и глобальные переменные. Рекурсия и ее связь с циклами.

Суммирование ряда с заданной точностью. Абсолютная и относительная погрешности вычислений.

Определенный интеграл и его графическая интерпретация. Формула Ньютона-Лейбница. Использование методов численного интегрирования. Формулы прямоугольников, трапеций, парабол. Их сравнительная оценка.

Постановка задачи метода наименьших квадратов и ее сведение к решению системы линейных уравнений. Использование операций матричной алгебры для решения задач линейной регрессии.

Аналитические и численные методы решения алгебраических уравнений. Использование методов половинного деления и касательных для приближенного решения нелинейных уравнений.

Определение дифференциального уравнения; постановка задачи Коши для дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера для решения задачи Коши. Численное решение системы дифференциальных уравнений.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение

Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач
-------------------	--------------------	---------------------------	--	--

Рейтинговая оценка знаний студентов обучения вычисляется по следующей схеме: каждое выполненное студентом задание оценивается преподавателем по 10-балльной шкале, при этом учитываются результат выполнения задания, ответы студента на задаваемые преподавателем вопросы и время сдачи задания в соответствии с календарным планом. Каждое задание имеет вес, зависящий от сложности, вес изменяется от 1 (самые простые) до 9 (наиболее сложные). Также по 10-балльной шкале оцениваются результаты компьютерного тестирования студентов по основным разделам дисциплины. Все выставленные оценки заносятся преподавателем в базу данных, где хранятся сведения об успеваемости студентов. Оценки каждого отдельного студента, умноженные на вес, суммируются, полученная сумма дает абсолютное значение рейтинга:

$$R_A = \sum_i M_i \cdot W_i$$

где M_i – выставленная преподавателем оценка, а W_i – вес задания.

В базе данных сведений об успеваемости студентов существует запись о «тестовом» (виртуальном) студенте, которому по всем обязательным для выполнения заданиям выставляется максимальная оценка (10 баллов). Посчитанный для этого студента рейтинг является основой для вычисления относительного значения рейтинга (измеряемого в процентах) всех остальных (реальных) студентов:

$$R_R = \frac{R_A}{R_T} \cdot 100$$

где R_A – абсолютное значение рейтинга, а R_T – рейтинг «тестового» студента.

Кроме заданий, обязательных для выполнения всеми студентами, имеются дополнительные, которые преподаватель может выдать хорошо успевающим студентам по их просьбе. Оценки за эти задания также учитываются при расчете абсолютного значения рейтинга, таким образом, относительное значение рейтинга студента может превышать 100%.

Критерии выставления итоговых оценок

Зачет за 1-ый семестр «автоматом» получают студенты, набравшие относительное значение рейтинга не менее **50%** и не имеющие задолженности ни по одной из позиций учебного плана (обязательные для выполнения задания и прохождение компьютерного тестирования). Все остальные студенты сдают зачет преподавателю, причем задания, выполненные либо сданные в ходе зачета, оцениваются не более чем на 5 баллов.

Итоговая оценка за экзамен во 2-ом семестре выставляется студентам при условии отсутствия у них задолженностей по всем позициям учебного плана по следующей схеме.

Относительный рейтинг (%)	Итоговая оценка
35 – 59,99	удовлетворительно

60 – 79,99	хорошо
80 и выше	отлично

При желании повысить оценку, выставленную по результатам подсчета рейтинга, студент может сдавать экзамен в сессию, предварительно предупредив об этом своего преподавателя. Придя на экзамен и взяв билет, студент уже не может отказаться от попытки сдать его, при этом он получит ту итоговую оценку, которую заслужит на экзамене (от «отлично» до «неудовлетворительно»).

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать основные понятия в области информационно-коммуникационных технологий</p> <p>Знать: основные сведения об архитектуре и принципах работы информационных систем и компьютерных сетей;</p> <p>Знать: базовые принципы устройства и функционирования ЭВМ, а также способы их применения в различных областях человеческой деятельности</p> <p>Знать: основные методы организации работы программных средств удаленного коллективного доступа;</p> <p>Знать: основные методы обеспечения информационной безопасности</p> <p>Знать: основные базы данных химического профиля</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями</p> <p>Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.);</p> <p>Уметь: формализовывать описания алгоритмов</p> <p>Уметь: составлять простейшие вычислительные программы</p> <p>Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации химического содержания</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Владеть: навыками использования наиболее распространенного прикладного программного обеспечения</p> <p>Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных химического профиля</p> <p>Получить: опыт использования ЭВМ для научных расчетов, моделирования и коммуникаций</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>

