

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОГЛАСОВАНО**

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий ОП ВО

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)

наименование кафедры

доцент, канд.хим.наук Л.Т.  
Денисова

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА  
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
В НАУКЕ И ОБРАЗОВАНИИ**

Дисциплина Б1.О.02.01.07 МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА  
Компьютерные технологии в науке и образовании

Направление подготовки /  
специальность \_\_\_\_\_

Направленность  
(профиль) \_\_\_\_\_

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

---

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

---

04.05.01.31 Физическая химия

---

Программу  
составили

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

---

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью изучения дисциплины является: овладение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачей изучения дисциплины является: приобретение студентами знаний основных принципов формирования компьютерных сетей, построения научных и образовательных порталов, принципов формирования информационной научно-образовательной среды, а также навыков применения этих знаний для дальнейшей научной работы.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

<b>ОПК-3:Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения</b>	
Уровень 1	знать стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных используемые при решении задач профессиональной деятельности
Уровень 1	уметь выбрать и использовать соответствующее программное обеспечение для решения задач профессиональной деятельности
Уровень 1	владеть навыками работы со стандартным программным обеспечением и специализированными базами данных для решения задач
<b>ОПК-4:Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</b>	
Уровень 1	знать стандартные способы математической обработки данных и аппроксимации численных характеристик
Уровень 1	уметь качественно обрабатывать результаты и прогнозировать их поведение с помощью компьютерных программ
Уровень 1	владеть различными способами математической обработки данных и аппроксимации численных характеристик полученных результатов

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является базовой. Для ее освоения необходимо знания, навыки и умения, полученные при изучении следующих дисциплин:

Актуальные задачи современной химии  
Методика преподавания химии

Изучение данной дисциплины необходимо для выполнения научно-исследовательской работы и подготовки магистерской работы.

1.5 Особенности реализации дисциплины  
Язык реализации дисциплины Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад. час)	Семестр
		9
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>2 (72)</b>	<b>2 (72)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,39 (50)</b>	<b>1,39 (50)</b>
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,89 (32)	0,89 (32)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>0,61 (22)</b>	<b>0,61 (22)</b>
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Зачёт)</b>		

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Компьютерная и математическая обработка данных	8	20	0	12	ОПК-3 ОПК-4
2	Компьютерные технологии в науке	10	12	0	10	ОПК-3 ОПК-4
Всего		18	32	0	22	

#### 3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Принципы организации баз научных и справочных данных. Ознакомление с банком термодинамических данных NIST, рекомендациями ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций, информационными возможностями Chemweb	2	0	0
2	1	Компьютеризация измерительной аппаратуры. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	2	0	0
3	1	Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование пакета EXCEL, программных продуктов Maple, MathCad, Mathematica	2	0	0
4	1	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика).	2	0	0
5	2	Современные основные программные продукты: термодинамика – СНЕТ, Thermocalc, строение молекул – HyperChem, Dalton, Mopac, Gamess, кинетика – KINET, Kintecus, Polyrate.	2	0	0

6	2	Основные принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и аварийных ситуаций. ASPEN, STOA.	2	0	0
7	2	Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint.	4	0	0
8	2	Компьютерные технологии в обмене научной информацией (Интернет, электронная почта и электронные научные журналы). Компьютерные телеконференции	2	0	0
Всего			18	0	0

### 3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Принципы организации баз научных и справочных данных	4	0	0
2	1	Рекомендации ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций	4	0	0
3	1	Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	4	0	0
4	1	Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей	4	0	0



5	1	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	4	0	0
6	2	Современные основные программные продукты: термодинамика – СНЕТ, Thermocalc	6	0	0
7	2	Современные основные программные продукты: строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess	6	0	0
Всего			22	0	0

### 3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

## 4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Ивановский Р. И.	Компьютерные технологии в науке и образовании. Практика применения систем MathCAD PRO: учебное пособие для вузов по направлению "Системный анализ и управление"	Москва: Высшая школа, 2003

Л1.2	Сибирский федеральный университет [СФУ]. Центр технологий электронного обучения, Сибирский федеральный университет [СФУ]. Лаборатория по разработке мультимедийных электронных образовательных ресурсов	Компьютерные технологии в науке и производстве. Презентационные материалы. Банк тестовых заданий в системе UniTest: электронные приложения к теоретическому курсу	Красноярск: Сибирский федеральный университет [СФУ], 2008
------	---	---	---

## 5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## 6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Платонов Д. В., Минаков А. В., Дектерев А. А.	Компьютерные технологии в науке и образовании: учебно-методическое пособие [для бакалавров и магистров напр. 011200 «Физика», 140700 «Ядерная энергетика и теплофизика», 140800 «Ядерная физика и технологии», 222900 «Нанотехнология и микросистемная техника», 223200 «Техническая физика»]	Красноярск: СФУ, 2013
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Манзон Б. М.	Maple V Power Edition: крат. рук.	Москва: Филинь, 1998
Л2.2	Дьяконов В. П.	MATLAB: учебный курс	Санкт-Петербург: Питер, 2001
Л2.3	Дьяконов В.П.	Системы символьной математики Mathematica 2, Mathematica 3	М.: СК-Пресс, 1998

Л2.4	Дьяконов В.	Mathematica 4: Учебный курс	СПб.: Питер, 2001
Л2.5	Дьяконов В.П.	MATHCAD 2001: Специальный справочник	СПб. [и др.]: Питер, 2002
Л2.6	Дьяконов В. П., Усманов В. В.	Maple 6: учебный курс	Москва: Питер, 2001
<b>6.3. Методические разработки</b>			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л3.1	Ивановский Р. И.	Компьютерные технологии в науке и образовании. Практика применения систем MathCAD PRO: учебное пособие для вузов по направлению "Системный анализ и управление"	Москва: Высшая школа, 2003
Л3.2	Сибирский федеральный университет [СФУ]. Центр технологий электронного обучения, Сибирский федеральный университет [СФУ]. Лаборатория по разработке мультимедийных электронных образовательных ресурсов	Компьютерные технологии в науке и производстве. Презентационные материалы. Банк тестовых заданий в системе UniTest: электронные приложения к теоретическому курсу	Красноярск: Сибирский федеральный университет [СФУ], 2008

## **7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Э1	Компьютерные технологии в науке и образовании	<a href="http://lib3.sfu-kras.ru/PdfViewer/PdfViewer.ashx">http://lib3.sfu-kras.ru/PdfViewer/PdfViewer.ashx</a>
----	---	---

## **8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции.

Рекомендуемая литература для самостоятельного изучения:

1. Компьютерные технологии в науке и образовании/Сиб. Федерал. ун-т; сост. Д.В. Платонов, А.В. Минаков, А.А. Дектерев.- Красноярск: СФУ, 2013.-70с. – Режим доступа <http://lib3.sfu-kras.ru/PdfViewer/PdfViewer.ashx>?

viewid=631CCC88B8B9200C73DD4CA9ACAB0180331C247FA0A88C3C335CFCEC32E1B720721C41582F30B514765D8118AD23B93C36DCC1DEF43B9810229E01CE31EABEBC279EE4C931AA3AAD420A481A22618CA0

2. Дьяконов В.П., "Системы символьной математики Mathematica 2 и Mathematica 3", М.: СК Пресс, 1998.
3. Манзон Б.М., "Maple V Power Edition" (на русском языке), М.: ИИД Филинь, 1998.
4. Дьяконов В.П., Абраменкова И.В., "Matlab 5. Система символьной математики", М.: Нолидж, 1999.
5. Потемкин В.Г., "Система инженерных и научных расчетов Matlab 5.x", в 2-х томах, М.: Диалог-МИФИ, 1999.
6. Практический курс Excel XP [Электронный ресурс] : Версия 2.0. — / ООО "Кирилл и Мефодий". — М. : ООО "Кирилл и Мефодий", 2001. — 1 CD-ROM. — Системные требования: IBM PC, Pentium, RAM 32 Мб, Windows 98 и выше, звуковая карта SVGA видеокарта 1024x768, CD-ROM . — № гос. регистрации 0320200821.
7. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Кирьянова Л.С., Иванова Е.Н. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство. - СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. 480с.
8. Холоднов В.А. и др. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление / Под ред. И.П. Мухленова. - Л.: Химия, 1986.- 423с.
9. Березин Б.И., Березин С.Б., "Начальный курс Си и Си++", М.: Диалог-МИФИ, 1996.
10. Львовский С.М., "Набор и верстка в пакете LaTeX", М.: Космосинформ, 1995.
11. Кнут Д.Е., "Все про TeX", Протвино: АО RDTeX, 1993.
12. Грешилов А.А. Как принять наилучшее решение в реальных условиях. — М.: Радио и связь, 1991. — 375 с.
13. Мушик Э., Мюллер П. Методы принятия технических решений. — М.: Мир, 1990. — 321 с.
14. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Регсдел К. Оптимизация в технике: В 2-х кн. Пер. с англ.-М.:Мир,1986.-320с.,349 с.
15. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике. - М.:Мир, 1986,-349 с .
16. Потемкин В.Г. Система Matlab. Справочное пособие. — М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 1997. — 350 с.

## 9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

### 9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

9.1.1	Microsoft Office Professional Plus 2007.
9.1.2	Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX

### 9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	1. Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU. Полнотекстовая коллекция «Российские академические журналы on-line» (издательство «Наука») включает 139 журналов. Заключено лицензионное соглашение (до ноября 2021 г.) об использовании ресурсов со свободным доступом с компьютеров университетской сети.- Режим доступа: <a href="http://elibrary.ru/">http://elibrary.ru/</a> .
9.2.2	2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. – Режим доступа: <a href="http://www.nature.com">http://www.nature.com</a> .
9.2.3	3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. – Режим доступа: <a href="http://search.ebscohost.com">http://search.ebscohost.com</a>
9.2.4	4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг) . – Режим доступа: <a href="http://www.journals.cambridge.org">http://www.journals.cambridge.org</a>
9.2.5	5.Royal Society of Chemistry - журналы открытого доступа. - Режим доступа: <a href="http://pubs.rsc.org">http://pubs.rsc.org</a> .
9.2.6	6.Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier. В комплект подписки Freedom Collection издательства Elsevier входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины, размещенные на платформе ScienceDirect, (23 предметные коллекции), охват более 1900 названий журналов. Архив 2010-2014 гг. - Режим доступа: <a href="http://www.sciencedirect.com">http://www.sciencedirect.com</a>
9.2.7	8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений-Режим доступа: <a href="http://chemstat.com.ru/">http://chemstat.com.ru/</a> .
9.2.8	9. База данных термодинамических величин ИВТАНТЕРМО. -Режим доступа: <a href="http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/">http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/</a>
9.2.9	10. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.
9.2.10	11. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. -Режим доступа: <a href="http://znanium.com/">http://znanium.com/</a>

## **10 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.