

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»

«Информационные технологии в науке и производстве»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) – Химия функциональных наноматериалов

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20__

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки магистров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
профессор кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20__ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Информационные технологии в науке и производстве» является получение углубленных знаний в области современного программного обеспечения и компьютерных технологий, используемых для обработки и анализа научной и производственной информации.

Задачами дисциплины являются:

- формирование представления о математическом и компьютерном моделировании, информационных системах обработки научной информации, принципах планирования и организации экспериментов;
- формирование способности использования методов компьютерного моделирования, планирования и организации экспериментов для решения научных задач в области химии и химической технологии;
- формирование навыков компьютерного моделирования, обработки данных; работы с современным программным обеспечением, используемым в научной и производственной областях деятельности.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 ОП. Для изучения курса требуются знания, умения и навыки, полученные в процессе изучения дисциплин: «Информатика», «Математика», «Численные методы в химии», «Химическая технология».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при изучении дисциплины «Компьютерные методы моделирования наноструктур». Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем для выполнения научно-исследовательской работы, написании статей и тезисов, при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закреплённая за дисциплиной в ОХОП:

УК-4. Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИУК-4.3. *Использует современные информационно-коммуникативные технологии и средства для коммуникации.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31.1. Современные компьютерные технологии планирования исследований, получения и обработки результатов научных экспериментов, сбора, обработки, хранения, представления и передачи научной и производственной информации.

Уметь:

У1.1. Применять современные информационно-коммуникативные технологии для решения научных и производственных задач.

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

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.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-1.2. *Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**Знать:**

32.1. Современное программное обеспечение, используемое в научной и производственной областях деятельности.

Уметь:

У2.1. Ориентироваться в программных средствах, применяемых в научной и производственной деятельности.

ИОПК-1.3. *Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**Знать:**

33.1. Основы математического моделирования на основании научных и производственных данных.

Уметь:

У3.1. Применять методы математического и компьютерного моделирования в научной и производственной областях деятельности.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение лабораторных работ; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
Общая трудоемкость дисциплины	3	108
Аудиторные занятия (всего)		36
В том числе:		
Лекции		12
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		24
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		72
В том числе:		

Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным занятиям		50
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		22
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		не предусмотрен
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Компьютерные технологии как инструмент обработки и интерпретации данных	8	1	-	1	6
2	Компьютерные технологии как инструмент моделирования систем	7	1	-	-	6
3	Компьютерные технологии как инструмент математического моделирования	16	2	-	4	10
4	Компьютерные технологии подготовки и оформления научной документации	15	1	-	4	10
5	Компьютерное кодирование химических соединений	20	2	-	6	12
6	Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований	9	1	-	2	6
7	Компьютерные системы стратегического и оперативного планирования	16	2	-	4	10
8	Математическое моделирование химико-технологических процессов	20	2	-	6	12
Всего на дисциплину		108	12	-	24	72

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ ОБРАБОТКИ И ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ»

Место эмпирических исследований в научном процессе. Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах. Обзор пакетов статистического анализа. Классификация пакетов статистического анализа. Обзор основных возможностей пакетов. Примеры использования пакетов для проведения многомерного анализа данных.

МОДУЛЬ 2 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ»

Понятие жизненного цикла системы. Методология RUP. UML-универсальный язык моделирования. Основные элементы. Диаграммы UML и их назначение.

МОДУЛЬ 3 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

Дискретизация баз наблюдений системы-пространства и времени при использовании компьютерных технологий. Основные возможности и ограничения использования компьютерных технологий для решения научных задач. Перспективы развития компьютерных технологий математического моделирования. Компьютерные технологии имитационного моделирования. Основные понятия имитационного моделирования. Компьютерные средства и системы имитационного моделирования. Примеры научных и производственных систем, исследуемых с использованием имитационного моделирования.

МОДУЛЬ 4 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ И ОФОРМЛЕНИЯ НАУЧНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ»

Понятия о стандартах оформления научной документации. Шаблоны и их использование. Редакторы математических формул, редакторы научной графики.

МОДУЛЬ 5 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОДИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование молекул; таблицы смежности и матрицы связности. Расчетные методы компьютерной химии. Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы); метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

МОДУЛЬ 6 «ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ»

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

МОДУЛЬ 7 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ СТРАТЕГИЧЕСКОГО И ОПЕРАТИВНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ»

Средства управления проектами. Методы сетевого планирования и их реализация в компьютерных технологиях. Автоматизация построения бизнес-планов. Компьютерная поддержка принятия управленческого решения. Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.

МОДУЛЬ 8 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Математическое моделирование химико-технологических процессов. Решение прямой задачи химической кинетики. Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов, обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений), метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций).

5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость в часах
Модуль 1 Цель: формирование представлений о приемах компьютерной обработки информации.	Принципы компьютерной обработки экспериментов. Формирование информационных баз данных.	1
Модуль 3 Цель: формирование представлений о принципах компьютерного и математического моделирования.	Принципы математического моделирования. Примеры моделирования производственных процессов. Моделирование и обработка научных данных.	4
Модуль 4 Цель: формирование представлений о методах оформления документов	Оформление научных документов.	1
Модуль 5 Цель: формирование навыков кодирования химических соединений	Построение деревьев синтеза веществ. Расчет термодинамических и энергетических параметров молекул квантовыми методами Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной динамики Изучение визуализации молекул и получение информации о конформации электронных облаков в сложных молекулах	6

Модуль 6 Цель: формирование навыков построения экспертных систем.	Основы компьютерных нейронных сетей. Основы генетических алгоритмов.	2
Модуль 7 Цель: формирование навыков планирования эксперимента.	Компьютерное планирование производственного процесса. Системы автоматизированного проектирования.	4
Модуль 8 Цель: формирование навыков математического моделирования химико-технологических процессов.	Изучение вопросов интеграции, обмена данными между компьютерными технологиями. Принципы построения компьютерных технологий в автоматизированном производстве. Решение задачи параметрической идентификации кинетических моделей. Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	6

5.4. Практические занятия

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы магистрантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к зачету.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы лабораторных занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Фаддеев, М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента : учебное пособие / М.А. Фаддеев; Фаддеев М.А. - Нижний Новгород : Нижний Новгород : ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2010. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - URL: <https://e.lanbook.com/book/152927> . - (ID=81446-0).

2. Зубова, Е.Д. Информационные технологии в профессиональной деятельности : учебное пособие для вузов / Е.Д. Зубова. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 03.08.2022. - ISBN 978-5-8114-9347-0. - URL: <https://e.lanbook.com/book/254681> . - (ID=149273-0).

3. Маликов, Р.Ф. Основы математического моделирования : учебное пособие для вузов / Р.Ф. Маликов. - 2-е изд. - Москва : Юрайт, 2022. - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-15279-1. - URL: <https://urait.ru/bcode/488153> . - (ID=148222-0).

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Цымбал, В.П. Синергетическая концепция создания моделей и технологий : учебное пособие для вузов / В.П. Цымбал, П.А. Сеченов, И.А. Рыбенко. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-15011-7. - URL: <https://urait.ru/bcode/486387> . - (ID=145706-0).

2. Пен, Р.З. Статистические методы математического моделирования, анализа и оптимизации технологических процессов : учебное пособие для вузов / Р.З. Пен, В.Р. Пен. - 2-е изд. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 03.10.2022. - ISBN 978-5-507-45300-9. - URL: <https://e.lanbook.com/book/264239> . - (ID=141007-0)

3. Петраков, Ю.В. Теория автоматического управления технологическими системами : учеб. пособие для вузов по направлению подготовки 220100 - Системный анализ и упр. / Ю.В. Петраков, О.И. Драчев. - М. : Машиностроение, 2008. - 336 с. : ил. + 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-217-03391-1 : 605 p. - (ID=92562-4)

4. Стрельцова, Е.Д. Методология научных исследований. Математическое моделирование как метод научного познания : учебное пособие / Е.Д. Стрельцова; Южно-Российский государственный политехнический университет имени М.И. Платова. - Новочеркасск : Южно-Российский государственный политехнический университет имени М.И. Платова, 2016. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-9997-0610-2. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180935> . - (ID=145340-0).

5. Черный, А.А. Компьютерные дополненные программы математического моделирования и расчетов по математическим моделям : учеб. пособие для вузов

/ А.А. Черный; Пенз. гос. ун-т . - Пенза : Пензенский гос. ун-т , 2007. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: http://window.edu.ru/window/catalog?p_mode=1&p_rid=59773&p_rubr=2.2.74.12 . - (ID=80860-0).

6. Черный, А.А. Математическое моделирование при планировании экспериментов на трех, четырех, пяти уровнях фактора и при неодинаковом количестве уровней первого и второго фактора : учеб. пособие / А.А. Черный; Пенз. гос. ун-т . - Пенза : Пензенский гос. ун-т , 2006. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: http://window.edu.ru/window/catalog?p_mode=1&p_rid=53997&p_rubr=2.2.74.12 . - (ID=81205-0).

7. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия : в составе учебно-методического комплекса / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - Москва : Солон - Пресс, 2005. - 535 с. : ил. - (Библиотека студента) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98003-188-X : 274 р. 94 к. - (ID=59885-10).

8. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107).

7.3. Методические материалы

1. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/99468> . - (ID=99468-1)

2. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - 84 с. : ил. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : [б. ц.]. - (ID=100791-71)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

1. Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

2. Microsoft Office 2019 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет.

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭКТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ" : сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.]. Диск 1,2,3,4. - М. :Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст : электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/121489>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Информационные технологии в науке и производстве» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети необязательно).

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

Учебным планом экзамен по дисциплине не предусмотрен.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля знаний и умений обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам выполнения дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у студентов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания студенту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания - 15.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность – 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации – «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачёта:

для категории «знать» (бинарный критерий):

ниже базового - 0 балл;

базовый уровень – 1 балла;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 1 балла.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке предоставляется:

база заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении);

методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытания и проставления зачёта.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ. При ответе на вопросы зачета допускается использование справочного материала и непрограммируемого калькулятора при решении задач.

7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете.

1) Основные возможности и ограничения использования компьютерных технологий для решения научных задач.

- 2) Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах.
- 3) Обзор пакетов статистического анализа. Классификация пакетов статистического анализа.
- 4) Понятие жизненного цикла системы. Методология RUP.
- 5) UML-универсальный язык моделирования. Основные элементы. Диаграммы UML и их назначение.
- 6) Научные и производственные системы с использованием имитационного моделирования.
- 7) Компьютерные технологии имитационного моделирования. Основные понятия имитационного моделирования.
- 8) Компьютерные средства и системы имитационного моделирования.
- 9) Дискретизация баз наблюдений системы-пространства и времени при использовании компьютерных технологий.
- 10) Возможные схемы параметрической идентификации исходя из информации о явном виде уравнений.
- 11) Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.
- 12) Общие принципы кодирования химических формул.
- 13) Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, таблицы смежности и матрицы связности.
- 14) Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы).
- 15) Изучение термодинамических параметров химических соединений: метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.
- 16) Принципы компьютерного планирования органического синтеза.
- 17) Принципы применения в химии теории распознавания образов.
- 18) Использование экспертных систем в химии и химической технологии.
- 19) Экспертные системы, фреймы и семантические сети.
- 20) Компьютерная поддержка принятия управленческого решения. Компьютерное планирование органического синтеза.
- 21) Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.
- 22) Основные закономерности, исследование которых необходимо для изучения кинетики химической реакции.
- 23) Программы генерирования химических реакций.
- 24) Решение прямой задачи химической кинетики. Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров.
- 25) Методы оптимизации и решения системы дифференциальных уравнений, описывающих скорость химической реакции.

26) Методы проверки кинетической модели на плохую обусловленность и переопределенность.

27) Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, обратная задача химической кинетики, метод решения обратной задачи химической кинетики.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного студенту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия
Профиль – Химия функциональных наноматериалов
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
Дисциплина «Информационные технологии в науке и производстве»
Семестр 1

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО
ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах.
2. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Три возможные схемы параметрической идентификации, исходя из информации о явном виде уравнений.
3. Задание для проверки уровня «уметь» – 0 или 1 балл:
С помощью базы данных программы постройте двухцепочечный фрагмент ДНК со следующей последовательностью мононуклеотидов: аденин (А) – тимин (Т) – гуанин (Г) – цитозин (Ц) – А – Г – Ц – Т – А – А – Г – Ц – Т – Ц – А. Далее:
выявите наличие в структуре водородных связей, подсчитайте их количество между комплементарными азотистыми основаниями;
определите примерный диаметр спирали и количество нуклеотидов, приходящихся на один виток спирали.

Критерии итоговой оценки за зачет:
«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;
«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман