Дисциплина **«Информатика»** относится к базовой части блока математических и естественнонаучных дисциплин, является обязательным курсом, преподается в 1 и 2-м семестрах 1-го года обучения.

Программа дисциплины «**Информатика**» для студентов-химиков предусматривает решение двух основных задач: в процессе обучения студент должен овладеть основными концепциями этой области знаний и получить конкретные навыки использования компьютерных технологий для решения прикладных задач в сфере своей профессиональной деятельности. Основными разделами курса являются:

- Информационные технологии: информация, компьютер, операционные системы, компьютерный текст, электронные таблицы, базы данных, визуализация данных, компьютерные сети
- Практическое использование прикладных программ: операционные системы, компьютерный текст, электронные таблицы, базы данных, визуализация, компьютерные сети.
- Основы программирования на алгоритмическом языке высокого уровня и методы вычислений

Занятия по дисциплине включают лекционный курс и практикум работы за персональным компьютером.

Цели и задачи освоения дисциплины.

- Ознакомление с современными информационными технологиями.
- Выработка навыков работы с компьютерным программным обеспечением.
- Изучение элементарных принципов программирования на алгоритмическом языке.
- Знакомство с численными методами, применяемыми для обработки данных и математического моделирования.

Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6.0 зачетных единиц (216 часов), из них лекции - 34 часа, семинары – 68 часов, самостоятельная работа по «Информатике» – 114 часов (93 часа)

Вид работы	**Семестр**		**Всего**
	1	**2**	
Общая трудоёмкость, акад. часов	108	108	216
Аудиторная работа:	52	50	102
Лекции, акад. часов	18	16	34
Семинары, акад. часов	34	34	68
Самостоятельная работа, акад. часов	56	58	114
Вид итогового контроля (зачёт, зачёт с оценкой, экзамен)	зачет	экзамен	

Лекции

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела
1	Информационные технологии	Информация. Способы кодирования числовой, текстовой, графической информации. Единицы измерения информации. Компьютер как универсальное устройство по преобразованию информации. Фон-Неймановская архитектура компьютера. Адресуемая память. Однопоточный центральный процессор. Периферийные устройства. Роль программного обеспечения. Классификация программ (системные, прикладные). Операционные системы. 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, система разграничения доступа. Концепции Microsoft Windows. Окна, системное меню. Работа с диалоговыми окнами: поля, списки, кнопки. Буфер обмена: его назначение и примеры использования. Обработка текстов. Понятие текста и гипертекста, примеры. Символ, слово, строка, абзац. Регулярные выражения. XML и языки на его основе. Реляционные базы данных. Основные понятия реляционной алгебры: атрибут, кортеж, отношение. Операции соединения, проекции и селекции. Компьютерные сети. Локальные и глобальные сети. Internet, протоколы IP и TCP. Электронная почта, телеконференции. Адресная книга. Хранилище электронных сообщений: почтовый ящик, папки. Систематизация почты. Простейшие схемы документооборота. Технология клиент-сервер, протокол HTTP, информационная система World Wide Web.
2	Основы программирования и методы вычислений	Программирование. Алгоритм. Языки низкого и высокого уровня. Трансляция программы. Ошибки трансляции и ошибки исполнения. Исполнение консольного приложения. Отладка кода, использование точек останова

Семинары (практические занятия)

№ раздела	№ занятия	Тема
2	1	Операционная система Windows.
	2-13	Электронные документы. Подготовка документов в среде Microsoft Word.
	14-26	Электронные таблицы. Представление данных и вычисления в среде Microsoft Excel.
3	27	Знакомство со средой Microsoft Visual Basic. Линейные вычисления. Числовые типы значений. Ошибка вычислений.
	28-41	Вычисление с применением циклов. Суммирование рядов. Методы чис-

		ленного интегрирования. Численные методы решения нелинейных уравнений. Линейная регрессия.
	42-53	Вычисления с применением функций. Приближенное решение системы дифференциальных уравнений.

Примеры вопросов текущего контроля

Теоретические вопросы

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

Практические задачи

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.

$[AcOH]_w$, моль/л	$[AcOH]_s$, 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 (c = [AcOH])

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

В качестве аргумента и функции используйте величины c_w и c_s/c_w , 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 □ = 2,2⋯3,0Å шагом 0,05. Интегрирование произвести методом трапеций (шаг интегрирования должен быть не меньше 0,1).

Учебно-методическое обеспечение дисциплины

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. О.Б. Калугина, В.С. Люцарев. Работа с электронными таблицами. Microsoft Office Excel 2003. - М.: Интернет-Ун-т Информ. Технологий, 2006.
3. В.С. Люцарев, О.Б. Калугина. Основы программирования на Visual Basic. Теория и практика. - М.: Множительная лаборатория Химического факультета МГУ, 2008.
4. 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.

Программное обеспечение современных информационных компьютерных технологий

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