

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное агентство по образованию
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

В.Ю. Орлов
А.И. Русаков
С.В. Тихонов

Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности

Учебное пособие

Рекомендовано
Научно-методическим советом университета
для студентов специальностей Биология, Экология
и направления подготовки Экология и природопользование

Ярославль 2005

УДК 501.502
ББК 381я73
О 66

*Рекомендовано
Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного издания. План 2003 года*

Рецензенты:

Доктор химических наук, профессор Е.М. Плисс;
кафедра органической химии ЯГПУ им. К.Д. Ушинского

О 66 Орлов, В.Ю., Русаков, А.И., Тихонов, С.В. Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности: Учебное пособие / В.Ю. Орлов, А.И. Русаков, С.В. Тихонов; Яросл. гос. ун-т. – Ярославль: ЯрГУ, 2005. – 124 с.
ISBN 5-8397-0304-4

В пособии представлены материалы, отражающие применение новых информационных и телекоммуникационных технологий в образовательной и научной деятельности, описаны наиболее актуальные информационные ресурсы и программные продукты, рекомендуемые студентам-биологам, экологам, химикам. Пособие ориентировано на сопровождение учебных дисциплин «Информатика» (блок ЕН), «Новые информационные технологии в учебном процессе» (блок ФАК), «Математические методы в биологии» (блок ЕН), «Математические методы в экологии» (блок ЕН), «Основы обработки научных данных» (блок ОПД), обеспечение эффективной обработки и интерпретации научных данных при выполнении курсовых и дипломных работ.

Предназначено для студентов, обучающихся по специальностям 011600 Биология, 013100 Экология и направлению 511100 Экология и природопользование очной формы обучения.

УДК 501.502
ББК 381я73

Пособие разработано и издано при финансовой поддержке
и в рамках федеральной целевой программы «Интеграция», проект Б0090-2103.

© Ярославский государственный
университет, 2005

© Орлов В.Ю., Русаков А.И.,
Тихонов С.В., 2005

ISBN 5-8397-0304-4

Введение

В настоящее время является несомненной необходимостью широкого применения компьютерных (новых информационных) технологий в различных областях человеческой деятельности, и в частности в образовании. Студент любого вуза для получения глубоких знаний должен использовать компьютер как в аудиторном образовательном процессе, так и в самостоятельной работе, при выполнении учебно-научных исследований (в первую очередь курсовых и дипломных работ). Немаловажным разделом применения новых информационных технологий является и реализация блока учебных дисциплин педагогической направленности в классических и педагогических университетах. Отсюда встает задача систематизации приемов и методологии применения компьютерных технологий в образовательном и научном процессах. Масштабность и разноплановость этой проблемы ограничены рамками учебного пособия, и поэтому авторы акцентируют внимание на образовательной и научной деятельности биологической, экологической и химической направленности.

Новые информационные и телекоммуникационные технологии в учебном процессе

1.1. Особенности применения новых информационных технологий в учебном процессе

Под новыми информационными технологиями (НИТ) обычно понимают электронные способы введения, обработки, хранения и представления различной информации.

НИТ в учебном процессе у большинства до сих пор ассоциируются с преподаванием информатики. Однако последнее означает получение знаний о компьютерах, особенностях их функционирования и навыков работы с ними. **Новые информационные технологии в учебном процессе – это применение электронных способов введения, обработки, хранения и представления различной информации для обучения, развития и получения навыков по различным естественнонаучным и гуманитарным дисциплинам.**

Использование различных НИТ строится на основе **главных компонентов процесса обучения:**

- изложении предметного содержания;
- взаимодействии с преподавателями;
- выполнении контрольных и практических заданий.

Каждая модель тем или иным образом воздействует на эти компоненты. Такие неинтерактивные технологии, как видео-, аудио-, TV, могут быть использованы преимущественно на первом этапе. Они носят иллюстративный характер и являются скорее развивающими, чем обучающими.

В наше время термин НИТ относится в большей степени к современным компьютерным и телекоммуникационным технологиям, которые открывают новые возможности в процессе обучения, так как

затрагивают все компоненты последнего. Использование компьютерных технологий в учебном процессе требует особого подхода. Примером может служить неудача советской учебной компьютеризации 80-х годов. Это было связано с отсутствием информационных и учебных программных ресурсов, отрывом от мировых тенденций и с тем, что проблема была поставлена раньше, чем созрело ее осознание обществом.

К числу **дидактических принципов**, на которых основаны компьютерные технологии передачи информации и общения, в первую очередь следует отнести:

- принцип активности;
- принцип эффективности;
- принцип самостоятельности;
- принцип сочетания коллективных и индивидуальных форм учебной работы;
- принцип мотивации;
- принцип связи теории с практикой.

В среде российских педагогов-практиков, развивающих компьютерные технологии в образовании, существует ряд мифов, которые порой мешают разработке электронных курсов, негативно влияют на общие тенденции развития НИТ в обучении в России и зачастую противоречат друг другу. К таким мифам прежде всего относятся следующие:

- что электронный учебный курс можно получить, просто переведя в компьютерную форму учебные материалы традиционного очного обучения;
- что существующие учебные предметы делятся на пригодные и непригодные для применения НИТ;
- что при одинаковых критериях обученности образовательный процесс с использованием одних только компьютерных технологий должен давать лучшие показатели, чем традиционное очное обучение.

В результате создаются убогие "гипертекстовые учебники", "автоматизированные обучающие системы", системы "контроля знаний".

Основная идея применения компьютера в образовательном процессе состоит в том, что он, в отличие от книги, изображения в виде таблицы и др., – принципиально новый инструмент. Для его исполь-

зования необходима иная методика, иные приемы и специальные программы. Необходимо учитывать такой момент, как разное восприятие человеком информации с листа и с монитора.

Есть некоторые особенности восприятия человеком текста с экрана компьютера, а именно:

- Существуют принципиальные различия в освещении изображений на экране компьютера и на листе бумаги. Дисплей излучает свет, а лист отражает свет окружения. Поэтому при работе с компьютером рекомендуется приглушить свет в помещении или пользоваться локальным источником, который освещает лишь клавиатуру, ликвидировать все блики на экране, а при работе с текстом на бумаге свет от внешних источников должен быть достаточно ярким. Особенно серьезные проблемы возникают, если необходимо одновременно работать с информацией на бумаге и на экране. В таком случае лист бумаги должен быть освещен локальным источником.

- В нервной системе человека имеется механизм координации движений рук с движениями глазных мышц. Поэтому всегда легче читать то, что держишь в руках, по сравнению с тем, что лежит на столе. Координация движений рук и глаз позволяет быстро просматривать текст на бумаге, интуитивно находя нужную информацию.

- Фиксированное положение дисплея (как правило, у стены или иного предмета обстановки) делает затруднительным расслабление глаз путем переключения на более далекий предмет. Как следствие, глаза утомляются быстрее, чем при чтении текста на бумаге.

- В отличие от компьютера текст на бумаге не требует привязанности к источнику питания, не вызывает необходимости держать тело в определенном положении, чтобы сфокусировать зрение.

Вместе с тем компьютерное представление информации имеет существенные **преимущества** в следующих ситуациях:

- для быстрого получения краткой информации;
- для немедленного действия;
- для организации диалога;
- для поиска сложных текстов и данных;
- для визуализации сложных процессов и явлений.

1.2. Основные направления применения новых информационных технологий в образовательном процессе

В настоящем разделе будет кратко рассмотрено применение НИТ в образовании. Основные направления использования компьютерных технологий в учебном процессе можно обозначить следующим образом:

- контролирующие системы;
- "интеллектуальные" обучающие системы с элементами контроля знаний;
- модельные системы для практической и индивидуальной работы;
- базы данных (классические и ГИС).

Электронные контролирующие системы – одно из первых применений компьютера в образовании, в том числе в химическом, биологическом и экологическом. К ним, прежде всего, относятся простейшие системы – текстовые "угадайки". Они просты в создании и использовании, доступны для изменения контрольных заданий, однако малоэффективны как с методической точки зрения, так и с точки зрения использования компьютеров. Повышение эффективности их использования возможно с применением продуманной тестовой схемы и автоматическим анализом результатов теста для получения среза знаний.

Более сложными являются контрольные системы с применением элементов графики (например, построение химических формул и уравнений реакций). Они более эффективны, однако сложный и зачастую нелогичный интерфейс подобных программ приводит к тому, что основной задачей обучаемого становится не контроль знаний по дисциплине, а попытка справиться с программой.

Более эффективным и перспективным является включение контролирующих блоков в обучающие системы.

Обучающие системы

Наиболее примитивные обучающие системы ("электронные учебники") – текстовая информация, представленная в электронном виде, иногда в виде гипертекста. Такая система не несет никаких преимуществ для учебного процесса. Единственное – удобная форма хранения этой информации и система поиска (при наличии системы управления базами данных). Возможные перспективы подобных систем – применение совместно с контролирующей программой либо использование в качестве справочной базы. Несколько расширяет возможности подобных "электронных учебников" применение графических материалов.

Современное состояние – **мультимедийные обучающие системы с элементами контроля знаний**. Структура информации имеет вид или гипертекстового документа, или базы данных. Системы контроля знаний в подобной образовательной среде играют роль либо "контролера" (допустить или не допустить к дальнейшему материалу при прохождении промежуточного теста), либо тьютора (указывают на конкретный раздел материала, который необходимо дополнительно изучить). Основные критерии подбора обучающих систем для использования в учебном процессе – эффективная, непротиворечивая структура, эффективная система поиска и отбора информации, эргономичный интерфейс (учитываются все параметры эргономики – от цветовой гаммы до приемлемости графических материалов и структуры текстовых и гипертекстовых документов).

В обучающих системах реализуются практически все указанные выше направления использования компьютерных технологий в образовательном процессе. На сегодняшний день применение мощных компьютеров и сетевых технологий позволило говорить уже не просто об обучающих системах, а об информационно-образовательной среде образования.

Формирование информационно-образовательной среды обеспечения эффективного обучения с возможностью удаленного доступа по естественнонаучным дисциплинам требует решения целого ряда задач, таких как: отбор учебных материалов, в том числе наиболее методически существенных эффектов и явлений в указанной области

для целей открытого образования; корректное информационно-методическое наполнение; разработка методов их представления в электронной информационно-образовательной среде; отработка способов его эффективного применения в образовательном процессе с удаленным доступом как в целях получения знаний и навыков, так и в целях их контроля.

Следующий раздел посвящен вопросам и проблемам представления в открытом образовании учебных курсов и материалов химической, биологической и экологической тематики. Сразу следует определить, что речь идет о подходах к использованию информационных и телекоммуникационных технологий в открытом образовании указанных направлений и касается русскоязычных ресурсов. И этот комплекс задач – предоставление образовательных услуг химической и биологической тематики, применение компьютерных технологий, развитие открытого образования – на настоящее время решен далеко не полностью и является предметом оживленных дискуссий. И если электронные версии курсов по информатике, по прикладным гуманитарным дисциплинам («Менеджмент» и др.) достаточно широко распространены в российском и мировом открытом образовании, то выбор естественнонаучных дисциплин выглядит намного беднее. По этой тематике чаще всего мы можем наблюдать отдельные теоретические специальные курсы, методические материалы, текстовые задания. Так, имеются представленные в режиме удаленного доступа контрольные и тестовые задания по дисциплинам естественнонаучных специальностей (например, Тульский государственный университет на сайте системы дистанционного обучения burma.tsu.tula.ru:7777/ поддерживает в режиме удаленного доступа сопровождающую информацию и контрольные задания для целого ряда инженерных и естественнонаучных специальностей). Поэтому ниже мы рассмотрим проблемы учебных материалов по естественнонаучной тематике на примере биологии и химии, при использовании их в электронной среде системы открытого образования.

1.3. Электронная среда системы естественнонаучного образования

1.3.1. Структура локальной электронной среды

Первоначально мы рассмотрим некоторые общие вопросы, касающиеся электронной среды системы образования. Ее можно представлять на двух уровнях: **локальном** (набор программных средств и информационных ресурсов поддержки отдельного курса на отдельном компьютере или в рамках корпоративной сети) и **глобальном** (доступ к программным и информационным образовательным ресурсам в масштабе региона или страны). Рассмотрим аспекты среды поддержки локального отдельного курса, дисциплины, предмета. Ее основой являются электронные образовательные ресурсы, зачастую называемые электронными учебниками.

Разработка электронных образовательных ресурсов на сегодняшний день – это активно развивающаяся область создания программного обеспечения образования различных уровней. Электронные учебные пособия позволяют интенсифицировать процесс обучения, а также предоставляют ряд совершенно новых средств и методов обучения, таких, например, как дистанционное обучение в интерактивном режиме. Очевидно, что применение компьютерных технологий в процессе обучения определит технологию образования XXI века в общем и в частности для химического, биологического и экологического образования.

Вместе с тем, разработка и применение электронных образовательных ресурсов – достаточно новая, динамически развивающаяся область знания, и ей еще предстоит становление и развитие до уровня завершенных сформировавшихся методологий, чтобы стать полноценной информационной и образовательной технологией. Поэтому вопрос о принципах и методах построения, хранения и применения электронных учебных пособий является важным. В частности, это касается структуры новой технологии и реализующих ее информационных систем.

Прежде всего, следует определиться в областях применения электронных образовательных ресурсов. На современном этапе становится очевидным, что компьютерные и телекоммуникационные технологии эффективны как для общей подготовки школьников и специалистов по химии, биологии и экологии, так и для качественной и оперативной подготовки специалистов в узких областях знания.

Решение задач применения электронных образовательных ресурсов, а также новых проблем, которые возникнут в ходе практического применения новой технологии, должно происходить в рамках интегрированной информационной среды. Необходимость в интеграции связана с комплексностью решаемых задач, когда изменение в параметрах одной задачи существенно влияет не только на входные данные, но и на алгоритм решения других задач. Из этого следует, что основным принципом построения информационно-обучающей среды должен стать принцип интегрированности и иерархической открытости.

Каждый блок системы в зависимости от иерархии доступа должен быть открыт по входам, выходам, а также для реакции на внешние воздействия. Кроме того, необходимо, чтобы вся система в целом позволяла добавлять новые блоки, включая такие, которые специально для этой системы не разрабатывались.

Важным вопросом является вопрос о составе информационно-обучающей среды. На основе анализа литературных данных и собственных исследований можно представить его следующим образом: преподаватель-тьютор (куратор), обучаемый, электронная база (фонд) данных, система управления данными и обучением, блок анализа данных.

Важную роль в функционировании информационно-обучающей среды играет ее оболочка. Эффективное обеспечение работы набора электронных образовательных ресурсов позволяет реализовать следующие **группы функций**:

- Ввод, хранение, представление в различных формах (в том числе и в печатной) электронных образовательных ресурсов;
- Обеспечение функционирования, пересылки и модификации электронных образовательных ресурсов и контролирующих программ;
- Регистрация обращений к ресурсам.

Основным методом контроля, видимо, станет метод компьютерного тестирования. Надо отметить, что электронные контролирующие системы – одно из первых применений компьютера в образовании, в том числе и в химическом. Классическая теория тестирования позволяет оперировать с количественными характеристиками объектов тестирования, что очень важно для сравнительного анализа при решении задач. Указанная теория и методика тестирования долгое время развивались в безмашинном варианте. Опыт показывает, что информационный процесс при компьютерном тестировании отличается от традиционного. Повышение эффективности использования компьютеров возможно с применением продуманной тестовой схемы и автоматическим анализом результатов теста для получения среза знаний.

К особенностям компьютерного тестирования относятся:

- особая структура компьютерных тестов,
- особая система оценки прохождения теста,
- особые способы предъявления заданий теста.

Возможно использование более сложных контролирующих систем с применением элементов графики (например, построение химических формул и уравнений реакций). Весьма эффективным и перспективным является включение контролирующих блоков в обучающие системы.

Одной из основных функций информационно-образовательной среды является представление электронных образовательных ресурсов и оценка их качества. **Качество электронного учебника** определяется целым рядом параметров:

- способностью обучать;
- эффективностью затрат на его создание и сам процесс обучения;
- интегрированностью;
- непротиворечивой структурой;
- эффективной системой поиска и отбора информации;
- эргономичным интерфейсом (учитываются все параметры эргономики – от цветовой гаммы до приемлемости графических материалов и структуры текстовых и гипертекстовых документов).

Как указывалось выше, современное состояние электронных комплексов – мультимедийные обучающие системы с элементами контроля знаний. Структура информации имеет вид или гипертекстового документа, или базы данных. Системы контроля знаний в подобной образовательной среде играют роль либо "контролера" (допустить или не допустить к дальнейшему материалу при прохождении промежуточного теста), либо тьютора (указывают на конкретный раздел материала, который необходимо дополнительно изучить). Существенный эффект в естественнонаучных дисциплинах следует ожидать от использования компьютерных моделей с визуализацией получаемых результатов. Это позволяет совмещать интерактивность применяемых учебных средств с поливариантностью их использования и множественностью получаемых результатов при высокой наглядности последних.

Структура применения современного электронного учебного пособия (базы данных, фонда) для поддержки учебного курса включает следующие разделы:

- Подробная формулировка цели курса,
- Структура целей (извлечение знаний),
- Структура критериев (построение системы контроля, в частности – тестов),
- Структура предъявления (сценарий предъявления обучающей информации).

Следует сразу заметить, что структура целей учебного курса совсем не обязательно будет соответствовать структуре электронных образовательных ресурсов. По одному и тому же тексту, набору графических материалов можно построить несколько различных траекторий достижения целей различных курсов. Практика показывает, что построить электронную систему поддержки образовательного процесса с хорошими показателями качества, используя один источник, затруднительно. Вместе с тем, стоит ограничиться в объеме вводимой информации – большой объем дополнительных данных отрицательно влияет на такую характеристику, как избыточность, а следовательно, и на эффективность образовательного процесса. Одним из основных преимуществ электронного пособия перед традиционным является возможность оперативной модификации, в соответствии с динамически изменяющимися целями и задачами обучения. Кроме того, при высоком уровне телекоммуникационных технологий возможно об-

ращение к недостающим внешним образовательным ресурсам. Построение локального всеобъемлющего пособия (в рамках учебной дисциплины) требует слишком больших затрат и зачастую связано с переводом в электронный вид существующих текстовых материалов.

Суммируя сказанное, мы можем утверждать, что на современном этапе развития предпочтительнее создавать небольшие по объему учебные пособия, каждое из которых посвящено изучению узкой и строго очерченной темы и ориентировано на решение образовательной задачи, трудно представляемой в классической бумажной форме (динамика, глубина, связи), либо компоновать их из достаточно ограниченных и независимых блоков. Последнее позволяет формировать индивидуальную образовательную траекторию при неизменности конечной цели курса. Межпредметные связи, без знания которых понимание изучаемой темы часто невозможно, следует оформлять в виде ссылок на другие ресурсы, специально посвященные теме ссылки.

1.3.2. Региональное и национальное информационно-образовательное пространство на базе Интернет-технологий

Рассмотрим проблему электронной среды образования в более широком аспекте – доступ к программным и информационным образовательным ресурсам в региональном и даже национальном масштабе. В настоящее время представляется очевидным, что необходимым условием существования системы непрерывного, открытого образования является формирование единого образовательного пространства, в частности в региональном масштабе. В данном разделе рассматривается один из существенных компонентов этого чрезвычайно широкого понятия – электронная среда, базирующаяся на современных информационных и телекоммуникационных технологиях. Всемирная компьютерная сеть, сложившаяся в конце XX века, значительно демократизировала процесс доступа к информационным ресурсам и обмен знаниями. Применение современных достижений в области информационных технологий позволяет существенно повысить эффективность процессов интеграции в сфере образования, в том числе средней и высшей ступеней образования, послевузовской подготовки.

Одной из проблем, которая на сегодняшний день успешно решается на базе использования современных информационных и теле-

коммуникационных технологий, является **обеспечение преподавателей и руководителей образовательных учреждений актуальной управленческой и методической информацией**. Примером может служить сервер WWW.INFORMIKA.RU, представляющий актуализированную управленческую и образовательную информацию. Он содержит также систему ссылок на другие образовательные ресурсы российского ИНТЕРНЕТА, в частности сайты российских вузов, УМО по химии и др. Следует отметить распространенные поисковые системы ("Yandex – найдется все"), позволяющие пользователю найти многие информационные материалы, обеспечивающие подготовку и поддержку учебного процесса.

Однако сервис и информация, представленные в INTERNET, сформированы явно недостаточно. Учебная информация все же многочисленна, разрозненна и слабо систематизирована. За редким исключением информация на сайтах не обновляется годами, а ее актуализация носит эпизодический характер.

Дистанционное образование с использованием ИНТЕРНЕТ-технологий и применение НИТ в учебном процессе предъявляет особые требования к учебным курсам. Фактически конкретный учебный курс должен исполнять роль предметной образовательной среды, обеспечивающей активное участие обучаемого в учебном процессе и способствующей формированию логики дисциплины как части мыслительного процесса студента. Кроме того, структура, интерфейс и информационное наполнение должны усиливать образовательные мотивации. Несомненно, важными представляются возможности самоконтроля и контроля усвоения учебного материала со стороны преподавателя с использованием современных телекоммуникационных технологий. Различный уровень учебных курсов предполагает различную структуру и формы представляемых учебных материалов.

Получение полного образования

По фундаментальным стандартным курсам: представляются комментарии и пояснения к учебникам, расширение отдельных положений, методические пособия и указания. Обязательно существование систем самоконтроля (например, тест с возвратом в случае неправильного ответа в раздел материала, дающего необходимую информацию, или ссылка на соответствующий раздел стандартного учебника). Пе-

риодическое проведение семинаров в виде краткосрочных телеконференций. Периодическое интерактивное общение с преподавателем (консультации и контрольные задания). Специализированные базы данных, ориентированные на выполнение учебных заданий.

Спецкурсы

Тезисное и полнотекстовое представление, сопутствующая информационная база (сама информация или система ссылок на нее), методические пособия и указания. Существование систем самоконтроля. Периодическое проведение семинаров, как очных с соответствующим сопровождением, так и в виде краткосрочных телеконференций. Периодическое интерактивное общение с преподавателем (консультации и контрольные задания). Выполнение самостоятельных заданий (эквивалент курсовых или более мелких работ). Набору тем и заданий соответствует информационная база (или система ссылок). Ограниченное число консультаций с использованием электронной почты.

Система контроля

Контроль осуществляется на семинарах по результатам выполнения самостоятельных заданий, при интерактивном общении и на видеоконференциях-экзаменах. Возможно использование тестовых мероприятий.

Обучение на отдельных курсах

Тезисное и полнотекстовое представление, сопутствующая информационная база (информация или система ссылок на нее), методические пособия и указания. Аналогичная вышеуказанному система контроля.

Отметим, что как при классическом, так и при описанном выше способе образования огромное значение имеет информационное и методическое обеспечение курсов. Отсюда следует необходимость существования распределенных информационных и методических ресурсов с общей координацией.

Другой особенностью сегодняшней электронной среды системы образования является аппаратная и коммуникационная обеспечен-

ность процессов образования в основном в крупных и средних населенных пунктах. То есть информационная электронная составляющая образовательного пространства имеет сегодня вид "крупноячеистой" сети, в значительной мере слабо актуализированной.

В то же время использование современных информационных и телекоммуникационных технологий позволяет решить целый ряд существующих образовательных проблем.

Одна из существующих проблем – разрыв уровня подготовки школьников с требованиями высшего образования к базовому уровню подготовки студентов. Особенно остро эта проблема стоит для выпускников школ малых населенных пунктов (в том числе в сельской местности). Немаловажным является информационный аспект работы с талантливыми детьми: обеспечение их необходимыми учебными, научно-популярными и научными данными. Весьма актуальным следует считать обеспечение педагогов региона методической и учебно-научной информацией, как по естественнонаучным, так и по гуманитарным дисциплинам, проведение процедур их переподготовки в сфере использования современных технологий образования с участием ведущих специалистов. Особого внимания заслуживает применение современных информационных и телекоммуникационных технологий в школьном учебном процессе при преподавании естественнонаучных и гуманитарных дисциплин, поскольку без этого невозможно широкомасштабное функционирование регионального информационно-образовательного пространства.

Указанные выше проблемы интеграции и создания системы непрерывного образования (необходимость повышения качества школьного образования, снижение разрыва между образованием различных уровней) требуют применения современных методик преподавания, в том числе широкого использования современных информационных и телекоммуникационных технологий (в традиционных и нетрадиционных сферах образования). Это связано, с одной стороны, с привлечением ведущих специалистов региона к решению этой проблемы, с другой – с расширенным доступом к современной методической, научной и учебной информации педагогов и учащихся всего региона.

Одним из подходов к решению поставленных задач является **формирование и функционирование** на базе современных информационных и телекоммуникационных технологий **образовательного**

пространства региона на основе интеграции школа – университет.

Структура и системы функционирования образовательного пространства, отвечающие требованиям масштабируемости и тиражируемости, включают в себя:

- информационно-ресурсную компоненту, поддерживающую распределенные базы данных методической и учебной информацией, обеспечивающую очный и удаленный доступ к хранимым материалам;

- методическую компоненту, которая представляет собой распределенные виртуальные лаборатории по вопросам разработки, внедрения и адаптации новых средств обучения, образовательных технологий и систем тестирования в системе среднего образования на основе интеграции школа-университет;

- организационную компоненту, к функциям которой относится организация процессов переподготовки и обучения с очным и удаленным доступом.

Такая образовательная среда представляет собой пространственно распределенную структуру, базирующуюся на нескольких площадках, интерактивно взаимодействующих между собой при помощи современных информационных и телекоммуникационных технологий.

Реализация подобной уникальной структуры в **Ярославском регионе** возможна, благодаря высокому уровню развития образовательных компьютерных сетей. Базовыми объектами информационно-образовательного пространства области, обеспечивающими интеграцию средней и высшей ступеней образования в регионе, являются Университетский центр Интернет (ЯрГУ) и Государственное образовательное учреждение Ярославской области – Центр дистанционного обучения школьников.

Развитие Ярославской региональной опорной сети академического, научно-исследовательского и образовательного направлений было начато в компьютерном центре Ярославского государственного университета им. П.Г. Демидова в 1994 году, благодаря принятому к финансированию Российским Фондом Фундаментальных Исследований проекту ЯрГУ N 94-01-01783 "Создание первой очереди регионального фрагмента базовой сети передачи данных и компонентов логической сети информационных ресурсов". Летом 1995 года в Ярослав-

ской области был осуществлен глобальный прорыв в области информатизации и создания информационного научно-образовательного пространства с реализацией программы, финансируемой Международным Научным Фондом (фондом Джорджа Сороса). На базе Ярославского госуниверситета был создан центр управления сетью – некая узловая точка паутины, нити которой связали школы, больницы, вузы, библиотеки, музеи, учреждения государственной власти и местного самоуправления. В настоящее время **Университетский центр Интернет ЯрГУ** является крупнейшим узлом телекоммуникаций и ресурсным центром в области высшего образования и науки.

Центр дистанционного обучения школьников Департамента образования Администрации Ярославской области является государственным учреждением дополнительного образования, осуществляющим очное и дистанционное обучение школьников предметам школьного и внешкольного циклов с использованием вычислительной техники и компьютерных телекоммуникаций. Центр является федеральной экспериментальной площадкой Министерства образования и науки РФ по определению и апробации основных направлений развития и распространения современных технологий в системе среднего образования.

Функционирование общего образовательного пространства осуществляется при активном взаимодействии как с другими вузами и научными учреждениями региона, так и с опорными (базовыми) школами, создаваемыми в районах региона. Указанные школы являются районными ресурсными центрами и обеспечивают доступ к информации не только для учащихся, педагогов, родителей, но и сельского социума в целом.

Решение информационно-методических и образовательных проблем возможно как с применением традиционных подходов (очные консультации, переподготовка с применением современных информационных технологий, распространение методической, учебной литературы и др.), так и при удаленном доступе к методическим и учебно-научным ресурсам. Последнее, при наличии соответствующих линий связи и оборудования, позволяет решать проблему территориальной удаленности преподавателей и учеников от методических, учебных материалов и от ведущих специалистов в области различных

сфер образования. Кроме того, минимизируются ограничения по разнообразию запросов и фактору времени.

Для выполнения этих функций информационной компоненты производится формирование базы методических, учебных материалов по гуманитарным и естественнонаучным направлениям, создание среды их эффективного хранения и использования, обеспечение возможности интерактивных и не интерактивных запросов к ведущим специалистам. Особо следует отметить необходимость применения эффективных методов визуализации и моделирования в представляемых учебных материалах, что повышает их эффективность в образовательном процессе.

В рамках реализации методической компоненты происходит формирование распределенных лабораторий, специализирующихся на создании и модернизации региональных ресурсов, адаптации и актуализации существующих.

1.4. Особенности реализации электронных курсов химической, биологической и экологической тематики

Вопросы представления электронных курсов химической, экологической и биологической направленности в различных формах (в том числе и открытых, реализуемых в режиме удаленного доступа) образования являются весьма непростыми. Значительная часть дисциплин указанных курсов связана с приобретением практических навыков химического и биологического экспериментов (например, проведение химических процессов, количественный химический анализ, обработка химических и биологических проб и др.). По-видимому, значительная часть экспериментальных разделов химии и биологии не может быть представлена в электронной среде, хотя существуют подходы, связанные с виртуальным практикумом. Вопросы последнего, применительно к курсам химической и биологической направленности, мы рассмотрим позднее. Однако приобретение навыков практической работы с реальной аппаратурой ставит вопросы лабораторного практикума, необходимость его использования в учебном процессе. Например, никакая компьютерная симуляция процесса титрования не заменит навыков проведения его со стеклянными прибора-

ми. Также вскрытие реального биологического объекта не может быть заменено набором картинок, так как не дает навыков обращения с соответствующим инструментом. То есть применение информационных технологий в процессе обучения не может предоставить корректную замену тактильных навыков эксперимента, что весьма существенно для биологического и химического образования.

Поэтому применение НИТ для осуществления учебного процесса наиболее эффективно при электронном представлении теоретических вопросов и некоторых экспериментальных проблем в виде имитационного (виртуального) практикума.

При этом следует отметить, что методы применения новых информационных и телекоммуникационных технологий в образовании до сих пор остаются предметом многочисленных дискуссий. Зачастую компьютерные технологии не приносят ничего принципиально нового в процесс преподавания, кроме некоторой внешней эффектности и компактности информационных материалов. Это относится к электронным вариантам текстовых материалов, графическим данным, которые с успехом могут быть представлены на бумажном носителе (что, кстати, упрощает работу с ними). Основная же идея применения компьютера состоит в том, что он, в отличие от книги, – принципиально новый инструмент. Для его использования нужна иная методика, иные приемы и специальные программы. При этом необходимо учитывать разное восприятие человеком информации с листа и с монитора.

Стоит выделить **видео- и анимированные данные**, которые действительно повышают эффективность учебного процесса при их применении. Однако отрывочность их использования, отсутствие интерактивности, поливариантности результатов нивелирует эффект их воздействия на обучаемого, и это, пожалуй, наиболее существенно. Простое применение ограниченного (пусть и достаточно большого) числа неменяющихся фрагментов заведомо сужает возможности освоения материала, понимания внутренних закономерностей процессов.

Существуют проблемы представления в информационно-образовательном пространстве и **теоретических аспектов химии, экологии и биологии**. С одной стороны, имеется огромное количество учебников, методической литературы по этим дисциплинам, с другой – требуются разъяснения и комментарии преподавателя к ним.

Это связано с тем, что многие процессы в этих дисциплинах носят динамический характер (например, механизмы химических реакций, обмен веществ в клетке) и на классическом бумажном носителе могут быть отображены весьма приблизительно. В этом случае электронная версия учебных материалов предоставляет уникальную возможность представления учебного иллюстративного материала в виде движущихся объектов – технология мультимедиа. Это существенно повышает эффективность изучения таких сложных вопросов, как механизмы химических реакций, мембранные процессы, обмен веществ и др. Таким образом, одним из основных направлений представления курсов химической и биологической направленности в открытом образовании следует считать широкую динамическую визуализацию химических и биологических процессов и явлений. Отсюда встает проблема выбора моделей объектов и явлений и способов их визуализации. Разумным является сочетание статичных изображений объектов, анимационных и оцифрованных видеофрагментов процессов и процедур, построения графических зависимостей и представление явлений в форме моделей с эффективной визуализацией (например, модель химического равновесия).

Однако такое направление развития ставит новую проблему. Качественные **графические материалы**, особенно представляющие динамику процесса, занимают, как правило, значительный объем памяти. Это не существенно при работе с учебным материалом, представленным на локальном компьютере (например, с CD). Но, в свою очередь, предъявляет при удаленном доступе высокие требования к скорости передачи информации. Это условие диктуется качеством телекоммуникационных каналов. На сегодняшний день в большинстве российских регионов уровень телекоммуникационных каналов оставляет желать лучшего. В то же время учебный процесс требует достаточно быстрой доставки пакетов учебной информации, в том числе графической. Существующее противоречие между уровнем развития телекоммуникационных каналов и потребностью быстрой доставки графической информации может быть решено разумной минимизацией графических материалов и применением соответствующих программных средств создания динамической графики. Для химических процессов это означает применение упрощенных формул, без излишних «красивостей».

В качестве программного продукта для создания динамических графических материалов разумно использовать такие программы, как Macromedia Flash, которая посредством использования векторной графики и соответственно записи объектов в виде математических формул позволяет минимизировать размер файлов. Для их воспроизведения служит программа, интегрирующаяся в браузер и бесплатно предоставляемая на сайте Macromedia. Было установлено, что визуализация отдельного химического или биологического эффекта, представленная схематически с использованием данного пакета, в большинстве случаев находится в пределах 30-50 кб, что является оправданным для большинства коммуникационных сетей. Кроме того, Macromedia Flash дает возможность пользователю интерактивно воздействовать на отображение эффекта (в зависимости от желания разработчика – в большей или меньшей степени), что, безусловно, способствует лучшему образовательному воздействию. Тем не менее возможны и другие программные варианты.

Для курсов как химической, так и биологической направленности разумным представляется создание большого количества малых графических файлов, отражающих небольшие фрагменты динамических процессов, а не больших по размеру анимационных вставок, представляющих длительную последовательность нескольких явлений. Это позволит быстро доставлять иллюстративный материал для сопровождения учебного курса.

Существенный эффект в естественнонаучных дисциплинах следует ожидать от использования компьютерных моделей с визуализацией получаемых результатов. Это позволяет совмещать интерактивность применяемых учебных средств с поливариантностью их использования и множественностью получаемых результатов при высокой наглядности последних.

Можно отметить и еще одну форму повышения качества образования с использованием информационных и телекоммуникационных технологий. Это – **создание учебных курсов по различным вопросам высококвалифицированными специалистами территориально удаленных академических институтов** и сопровождение их авторами с использованием современных телекоммуникационных технологий для повышения качества образования специалистов. Такой курс является не автономной обучающей системой с элементами кон-

троля, как электронный учебник: он служит формой взаимодействия, поскольку постоянно обновляется и содержит научные материалы (информацию и иллюстративный материал) территориально удаленного от вузов института РАН. Элементом такой формы обучения являются проводимые в режиме интерактивной телеконференции лекции ученых РАН по актуальным проблемам соответствующих учебных дисциплин.

В качестве разновидности такой формы обучения модно рассматривать видеолекции высококвалифицированных специалистов и педагогов по отдельным вопросам. Они могут быть реализованы как на локальном компьютере (запись на CD), так и в форме видеоконференции при удаленном доступе.

Перспективной формой телекоммуникационного взаимодействия в химическом, биологическом и экологическом образовании являются распределенные учебно-научные лаборатории с участием студентов. Работа в подобной лаборатории над общей проблемой совместно с ведущими специалистами является великолепной школой для обучаемых. Взаимодействие может быть организовано на уровне электронной почты, теле- и видеоконференций.

1.5. Электронные обучающие системы для отдельных компьютеров и локальных сетей

Рассмотрим, как на сегодняшний день представлено применение компьютерных технологий в химическом, экологическом и биологическом образовании.

Следует отметить появление на рынке достаточно обширного ряда программных и информационных ресурсов, ориентированных на школьный уровень образования и подготовку к поступлению в вузы. Прежде всего это продукция фирмы «1С» – серия CD, посвященных различным областям знаний и выдержанных, в целом на уровне школьного образования. Например, «1С: Репетитор. Биология». Данный программный продукт задуман и выполнен как электронный учебник, содержащий как текстовые, так и графические фрагменты. В основе программы лежит текст оригинального учебного пособия, снабженный значительным количеством иллюстраций и имеющий в качестве структурной основы систему гиперссылок. Иллюстрации на

диске представлены не только неподвижными картинками или видеофрагментами, но и «движущимися» схемами, которые позволяют наглядно показать ход того или иного процесса, «самораскрывающимися» картинками, изображениями с «всплывающими» по требованию пользователя подписями (чтобы не загромождать ими рисунок), аудиосопровождением. Помимо основного текста пособия, который включает в себя как материал школьной программы, так и большое количество дополнительной информации, в системе содержатся такие разделы, как биографии ученых, словарь-справочник, ряд таблиц со справочными сведениями по биологии и система электронных тестов – по 60 тестов в каждой из четырех основных частей (ботаника, зоология, анатомия и общая биология). Предусмотрена поисковая система.

Однако, при достаточно хорошей программно-технической реализации, содержание электронного пособия, в частности тестовой части, не лишено ряда недостатков и неточностей. В связи с этим преподаватели и авторы ряда статей рекомендуют пользоваться данным выпуском «или в школе под руководством преподавателя (а учитель, решивший использовать диск на уроке, должен, в свою очередь, предварительно внимательно ознакомиться с содержанием нужных разделов), или как дополнительным пособием – если школьник считает себя в целом готовым к сдаче экзамена и отдает себе отчет в том, что на диске присутствуют ошибки и неточности». При этом следует повториться, что программно-техническая часть находится на вполне современном уровне требований к электронным учебникам.

Следующий пример – достаточно распространенное электронное обучающее средство **«Репетитор по биологии Кирилла и Мефодия»**. Здесь реализована принципиально отличная от предыдущего компьютерного учебника концепция. В программе отсутствуют как текстовые блоки (кроме программы вступительных экзаменов), так и иллюстрации. Она полностью ориентирована на тестовую систему. Содержание составляют исключительно вопросы тестов и краткие ответы на них. При работе с системой эмулируются режимы экзамена и режимы обучения.

Использовать данный диск в качестве основного средства подготовки к экзаменам или для обучения в школе нельзя. Он может быть

полезен для тренировки после интенсивного изучения классического учебника.

Рассмотренные и подобные им информационные ресурсы являются жесткими, детерминированными системами. Невозможна их модернизация при использовании в учебном процессе, что ограничивает их применение и ориентирует, в основном, на самостоятельную работу учащихся.

Другим по идеологии подходом фирмы «Кирилл и Мефодий» является создание медиатек – фондов иллюстрационных и сопровождающих учебный процесс графических, видео-, аудиоматериалов. В подавляющем большинстве случаев они не могут применяться для самостоятельной работы учащихся (только в качестве иллюстраций), а ориентированы, в основном, на сопровождение работы преподавателя.

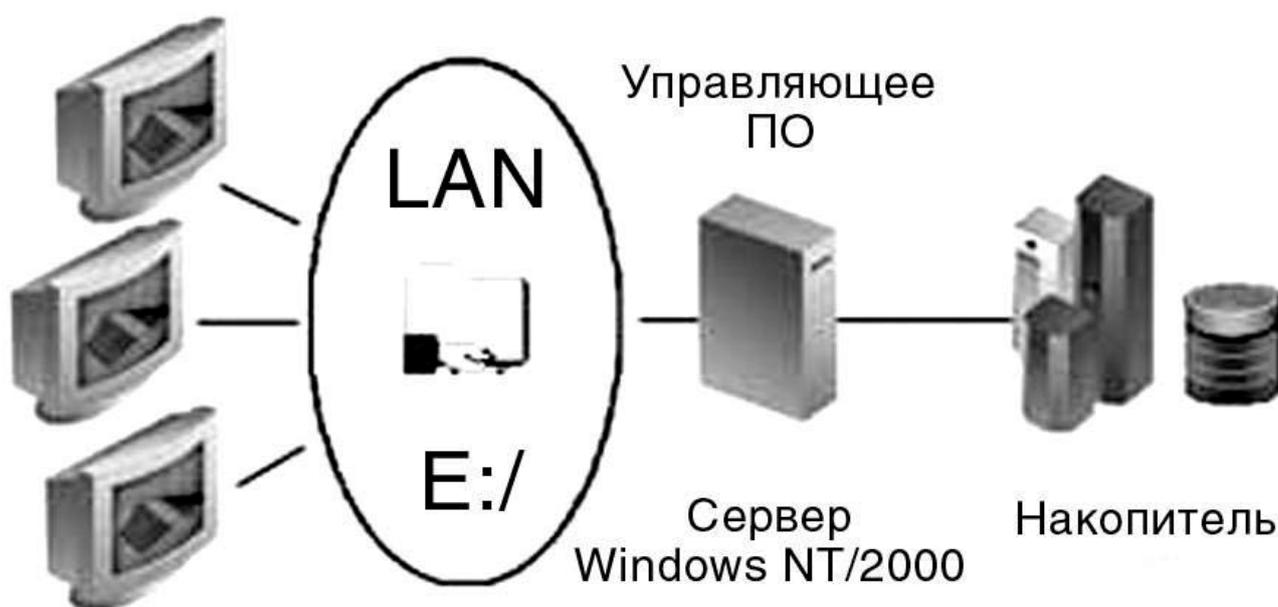


Рис. 1.1. Схема медиатеки

«Медиатека Кирилла и Мефодия», по определению самой фирмы, – база учебных материалов и пособий, представляющая собой огромное количество медиа-объектов (аудио-, видео-, фото-информация, двух- и трехмерная анимация, интерактивные панорамы и географические атласы, хронологические шкалы и многое другое) и доступная неограниченному количеству пользователей в реальном режиме времени.

Медиатека представляет собой роботизированный накопитель, позволяющий просматривать наборы CD/DVD дисков с самой разнообразной информацией одновременно с нескольких десятков компьютеров. В части естественнонаучных дисциплин (биологии, экологии и отчасти химии) "Медиатека Кирилла и Мефодия" включает:

- около 20 тысяч высококачественных фотоиллюстраций, слайдов, портретов, рисунков;
- более 6 часов видео и анимации (500 фрагментов);
- пять десятков видеофрагментов из истории науки и техники, кадры уникальных природных явлений;
- более пяти десятков анимационных моделей, иллюстрирующих физические процессы и принципы действия технических устройств, а также трехмерные реконструкции 7 чудес света;
- более полутора сотен видеосюжетов о жизни животных нашей планеты;
- "Географический атлас мира" с системой пошаговой детализации – более 200 интерактивных географических карт с режимом поиска;
- "Экосистемы Земли" (17 мультимедиа-панорам) – характерные ландшафты основных природных зон нашей планеты;
- "Эпоха динозавров" (5 мультимедиа-панорам) – анимированные панорамы доисторического мира, а именно – три периода мезозойской эры: триасовый, юрский и меловой.

Ценным свойством является возможность расширения и модификации медиатеки. На сегодняшний день создание подобных форм поддержки учебного процесса – активно развивающееся направление проектирования и реализации образовательных ресурсов среди разработчиков электронных учебных материалов

Существует достаточно обширный ряд образовательных программных продуктов по химии и биологии, которые могут быть получены через Интернет и установлены на отдельном компьютере. Коллекцию подобных ссылок (как и ссылок по всем вопросам дистанционного образования), поддерживает сервер WWW.INFORMIKA.RU. Так, по адресу: <http://www.informika.ru/text/database/chemy/Rus/dload.html> поддерживается следующий список файлов и программ, которые можно получить с сервера:

• ОБУЧАЮЩАЯ ПРОГРАММА "ХИМИЯ ДЛЯ ШКОЛЬНИКОВ В КАРТИНКАХ", DOS версия 4354 Кб предназначена для изучения органической и неорганической химии по разделам:

- предельные углеводороды;
- непредельные углеводороды;
- спирты и эфиры;
- карбоновые кислоты;
- комплексные соединения металлов;
- железо, кобальт, никель;
- марганец, технеций, рений.

Данная программа размещена на сервере с согласия авторов.

• ОБУЧАЮЩАЯ ПРОГРАММА ПО БИОЛОГИИ "БИОЛОГИЯ ДЛЯ ШКОЛЬНИКОВ И АБИТУРИЕНТОВ", DOS версия 2682 Кб представляет собой систему готовых программ и иллюстративных материалов, раскрывающих внутреннее строение и динамику работы органов и органоидов на примере организма человека:

- организм человека;
- кровеносная система;
- скелет и мышцы;
- нервная система.

Данная программа размещена на сервере с согласия авторов.

Подобные небольшие программы, являющиеся представителями обширного семейства электронных ресурсов DOS версий, весьма нетребовательны к аппаратному обеспечению и вполне могут применяться для самостоятельного изучения отдельных вопросов химии и биологии, хотя явно не предназначены для полной поддержки целых курсов.

Указанные выше коммерческие и некоммерческие продукты ориентированы, в основном, на школьное образование. Компьютерное сопровождение учебных дисциплин биологической и химической направленности для высшей школы разрабатывается часто самими преподавателями и специалистами вузов.

Примером системного подхода к созданию электронных образовательных ресурсов может служить система, получившая название Shopin, реализованная в АлтГТУ. Система Shopin предназначена для

организации информационной среды обучения. Она представляет собой сетевой комплекс из 4-х комплектов программ-оболочек, способных работать как взаимосвязанно, так и отдельно для создания и поддержки электронных образовательных ресурсов. В рамках естественнонаучной тематики было разработано электронное учебное пособие «Мониторинг и управление качеством вод речного бассейна», являющееся электронным аналогом книги А.А. Цхая «Мониторинг и управление качеством вод речного бассейна». Электронная среда отличается четкой структурированностью по целям различных уровней. Каждой из подцелей соответствует тест, успешное прохождение которого позволяет утверждать, что обучаемый освоил некоторую тему. Порядок прохождения тестов слабо регламентирован, что обеспечивает индивидуальный подход к каждому обучаемому.

В Московском государственном институте стали и сплавов задача формирования электронных обучающих систем решалась путём создания пакета обучающих программ, где основную дидактическую нагрузку несёт компьютерное моделирование химических процессов – от простейших, протекающих в пробирках, до более сложных, требующих специальных установок. Программы построены по принципу чередования информации, представляемой в виде имитируемого на экране монитора эксперимента и сопровождающих его схем, таблиц, рисунков с поливариантными заданиями, призванными закрепить материал и проконтролировать степень его усвоения. Использование в качестве зрительного образа текстов, подробных и многочисленных уравнений реакций сведено к минимуму. Особое внимание уделено процессам, идущим с изменением окраски реагентов, так как цвет в химии играет значительную роль.

Компьютерное моделирование химического эксперимента оказывается незаменимым при изучении процессов, непосредственное наблюдение за которыми нереально либо затруднено. В частности, полезно привлекать модельные представления при рассмотрении медленно протекающих процессов и для реакций, идущих со скоростью взрыва. Визуализация модельных данных позволяет обучаемому сконцентрировать своё внимание на основных особенностях рассматриваемых процессов, отвлечься от несущественных и второстепенных признаков, заглянуть внутрь реакционной системы, сканировать происходящее в ней в любом желаемом темпе или ритме. В этом не-

сомненное дидактическое преимущество имитационных моделей химических реакций перед их видеозаписями.

Кроме того, модельные представления в химическом образовании позволяют раскрыть суть, механизм процесса как на уровне всей химической системы, так и на уровне электронных представлений (например, для квантово-химических моделей).

Существенный эффект в естественнонаучных дисциплинах следует ожидать от использования **компьютерных моделей с визуализацией получаемых результатов**. Это позволяет совмещать интерактивность применяемых учебных средств с поливариантностью их использования и множественностью получаемых результатов при высокой наглядности последних.

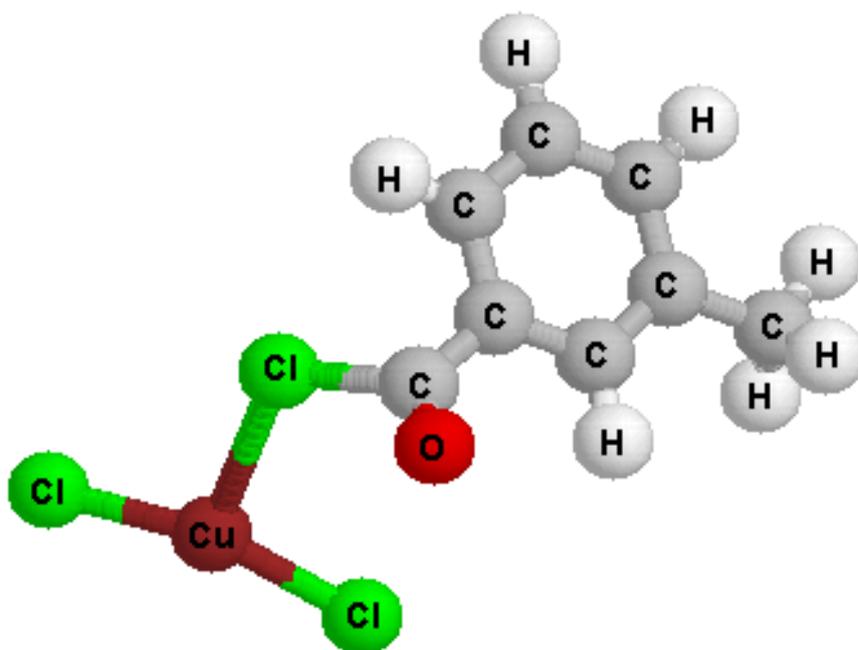


Рис.1.2. Вид активированного каталитического комплекса по данным квантово-химических расчетов.

Поэтому особо следует коснуться применения компьютерных моделей в открытом образовании химической и биологической направленности. Они позволяют получать разнообразную информацию при варьировании запросов, не столь детерминированы в отличие от баз данных. В качестве примера можно рассмотреть применение квантово-химических моделей в химическом образовании. Вводя хи-

мическую формулу соединения, обучаемый, используя квантово-химическое моделирование, получает данные о пространственной, электронной, орбитальной структуре молекулы. Результаты расчетов визуализируются. Например, на рисунке представлены результаты визуализации расчета неустойчивой молекулярной структуры. Изображение представляет собой не условную схему взаимного расположения атомов, а приближенное к реальному пространственное строение и отношение длин связей.

При этом можно моделировать практически любые структуры и получать для них новые данные. Таким образом, у обучаемого формируется понимание фундаментальной зависимости «структура – свойства», появляются знания о пространственном, электронном строении различных классов соединений. Кроме того, подобная модель может быть использована для целей контроля. Моделирование может осуществляться в режиме удаленного доступа.

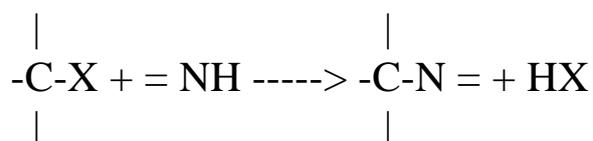
Другое направление применения моделирования в химическом образовании – это **использование синтетических моделей**. Они позволяют выработать у обучаемого навыки разработки путей органического синтеза.

Во второй половине 60-х годов рядом ученых была сделана попытка обучить компьютер органической химии, в частности основам органического синтеза, с целью направленного планирования органического синтеза сложных соединений.

В настоящее время компьютер технически готов принять и изобразить на дисплее любое соединение, выявить в нем структурные особенности и предложить для этого вещества ряд химических превращений из своего банка реакций. Существует несколько различных методов и технических приемов описания реакций. Классический подход имитирует способ мышления химика. Он основан на выделении характеристических структурных особенностей целевого соединения, дающих химику указания на конкретную реакцию или последовательность реакций, приводящих к созданию целевого соединения. Для компьютера планирование возможных путей синтеза и передача информации о них химику-синтетику состоит из следующих последовательных стадий.

Компьютер выделяет в целевом соединении структурные особенности, существенные для поиска путей его синтеза. Эта важная стадия наиболее близко имитирует мышление химика в той же ситуации.

Когда структурный фрагмент, определяющий возможный путь синтеза, выделен, ЭВМ оценивает, является ли его структурное окружение благоприятным или неблагоприятным для осуществления задуманного превращения. Компьютер заменяет в целевом соединении выделенный структурный фрагмент его предшественником. Например: амин может быть получен по реакции



Соответственно фрагмент C-N может быть заменен на C-X + NH. И так далее, до простейших доступных исходных соединений. Это так называемый ретросинтетический подход.

Однако зачастую требуется учитывать и прямой синтетический подход. Он может оказаться решающим, если необходимо учесть образование и свойства побочных продуктов реакции. Поэтому компьютер в настоящее время научился отвечать на вопросы о том, что получится, если мы смешаем реагенты A+B+C.

Проделанные процедуры позволяют получить несколько путей реакций целевых соединений из различных исходных продуктов. Дальнейший успех синтеза определяется уже человеческим фактором.

Активно применяются компьютерные модели в биологическом и экологическом образовании. Так, в Ярославском государственном университете при подготовке студентов-биологов в курсе «Математические методы в биологии» используется авторский программный продукт «хищник – жертва», моделирующий поведение особей в водной экосистеме.

Высокой ценностью для учебного процесса экологической направленности обладают геоинформационные системы (ГИС). **Геоинформационная система** – это совокупность аппаратно-программных средств и алгоритмических процедур, предназначенных для сбора, ввода, хранения, обработки, математико-картографического моделирования и образного представления геопространственной и прочей

информации. ГИС содержит данные о пространственных объектах, включает набор функциональных возможностей ГИС, в которых реализуются операции геоинформационных технологий, или ГИС-технологий, поддерживается программным, аппаратным, информационным, нормативно-правовым, кадровым и организационным обеспечением. Логически и организационно во всех ГИС можно выделить несколько конструктивных блоков, называемых также модулями или подсистемами, выполняющими определенные функции. Последние вытекают из четырех типов решаемых ГИС задач: сбора, обработки, моделирования и анализа данных, использования результатов при принятии решений.

Таким образом, ГИС может использоваться как:

- 1) информационная основа для изучения природных особенностей региона (в широком смысле этого понятия);
- 2) инструмент исследования динамики или прогноза процессов и явлений;
- 3) информационно-справочная система, по определенному запросу выполняющая поиск и выборку данных;
- 4) система, осуществляющая моделирование природных и искусственных систем и позволяющая на основе экспертных оценок принимать решения по управлению и регулированию.

Любая ГИС должна иметь систему визуализации данных, выводящую на экран имеющуюся информацию в виде карт, таблиц, схем и т.п.; систему управления данными, при помощи которой происходит их поиск, сортировка, удаление, добавление, исправление и анализ. Также двумя необходимыми компонентами ГИС являются системы ввода и вывода информации. Базы данных – обязательные компоненты ГИС. Топографическая основа карт обыкновенно хранится в файлах принятой в данной стандартной ГИС структуры, которые в принципе можно назвать файлами графических баз данных. Тематические базы данных содержат в себе нагрузку карты и дополнительные данные, которые относятся к пространственным, но на карту не наносятся: описание территорий или информация, содержащаяся в научных отчетах.

Обычная бумажная карта, особенно тематическая, зачастую бывает перегружена информацией. В ГИС компьютерные карты состоят из слоев: карта логически организована как **набор слоев информа-**

ции. Слои составляют объекты, объединенные одной темой, например вся гидрография. Карту можно представить себе в виде положенных друг на друга прозрачных пленок (слоев). Каждый слой содержит информацию одного класса: слои дорог, промышленных объектов, ландшафтов и т.д. На экран можно выводить отдельные слои информации или группы слоев в различных сочетаниях, а также все слои одновременно. Естественно, что на каждом слое можно разместить гораздо больше информации, чем данных по этой тематике на бумажной карте. Пользователь имеет возможность самостоятельного добавления новых слоев и послойного распределения информации. Послойное размещение информации значительно облегчает анализ: например, на экран выводится слой промышленных предприятий и слой уровня загрязнения воздуха. В некоторых ГИС в слое могут содержаться объекты одного типа, а не одной темы: слои точек, слои линий, слои площадей. Иногда в слое соединяются объекты, разные и по типу, и по теме, но чаще всего встречается все-таки логическая разбивка информации на слои.

Одних координатных данных недостаточно для описания картографической или сложной графической информации. Картографические объекты, кроме метрических, обладают некоторой присвоенной им описательной информацией (названия политических единиц, городов и рек). Характеристики объектов, входящих в состав этой информации, называют атрибутами. Совокупность возможных атрибутов определяет класс атрибутивных моделей ГИС.

Подобная высокая наглядность и объем разнообразной представляемой информации, возможность ее анализа и моделирования делают ГИС ценным образовательным инструментом для самых различных направлений.

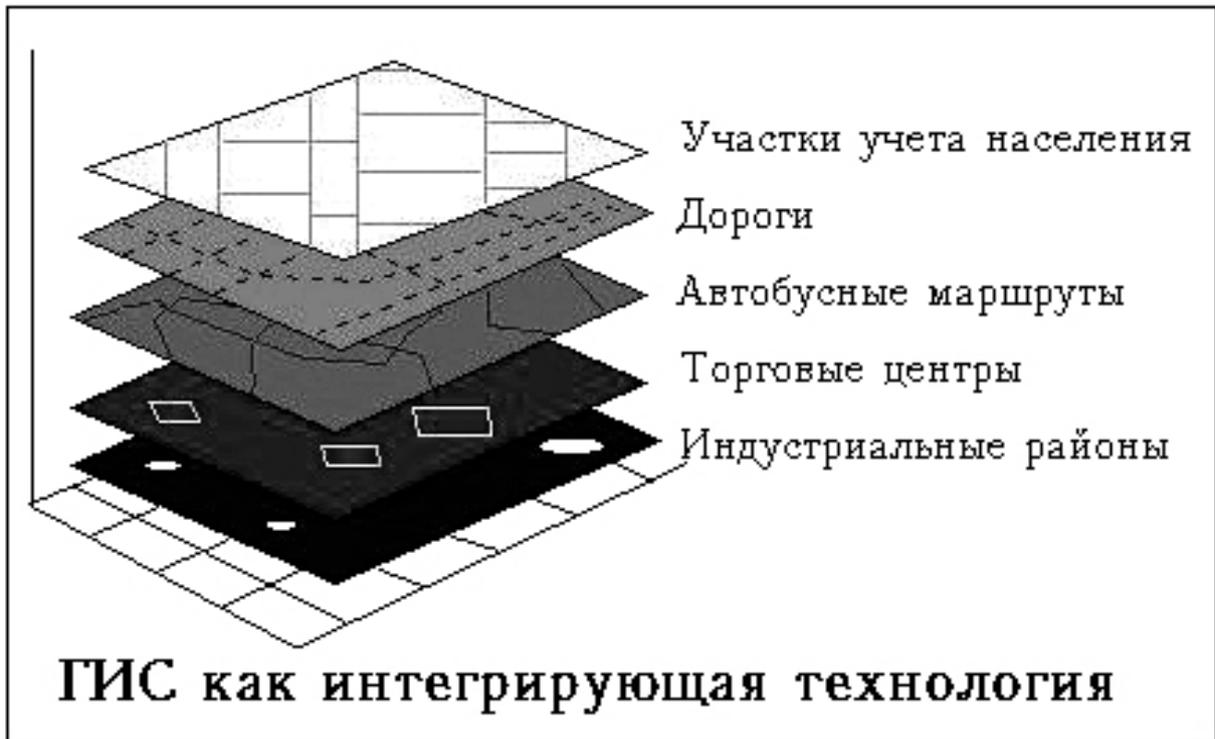


Рис. 1.3. Концептуальная схема организации данных в ГИС

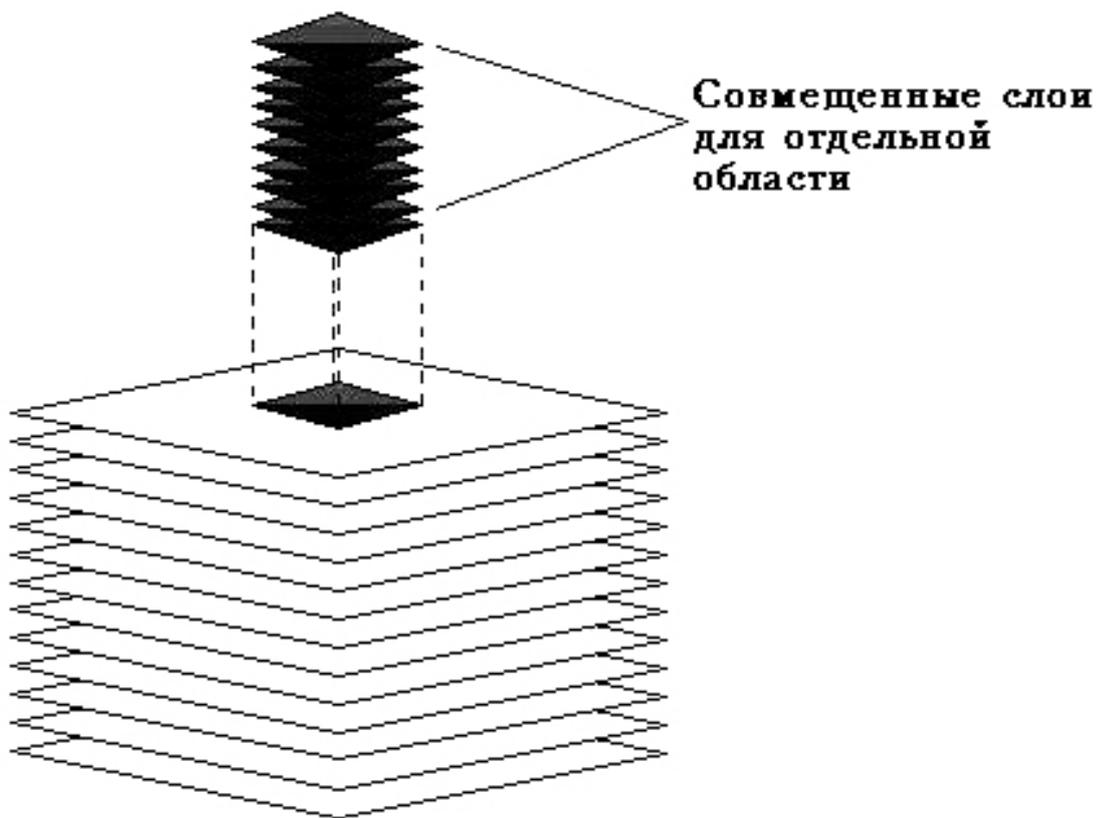


Рис. 1.4. Пространственная выборка (уточнение территории)

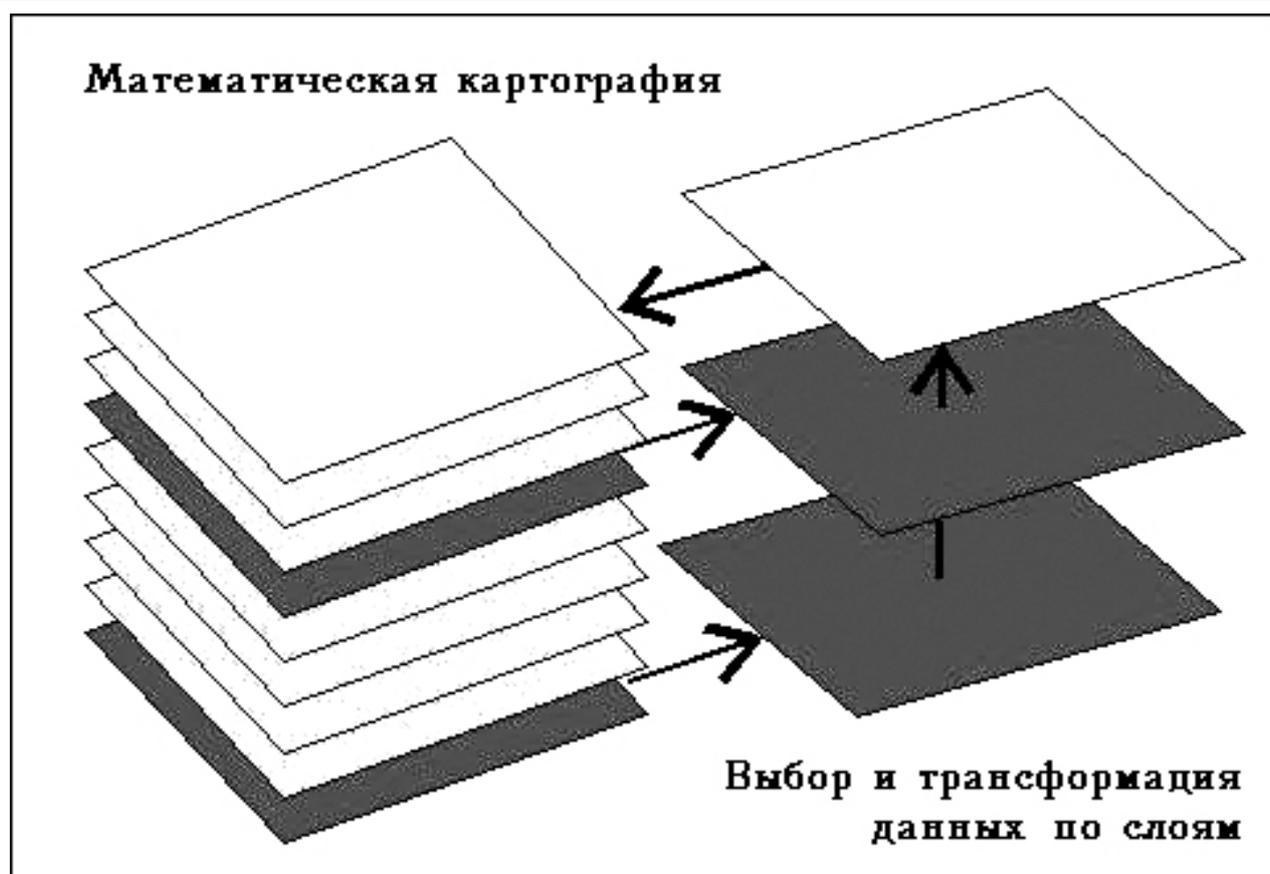


Рис. 1.5. Тематическая выборка (проблемно-ориентированная)

Несомненной ценностью для учебного процесса обладают специализированные программы экологической направленности, в которых использование разнообразных моделей позволяет представить картины загрязнения воздуха, почвы, водных систем в зависимости от набора факторов (загрязняющий агент, источник выброса, погодные условия, рельеф и др.) и которые базируются на ГИС-технологиях.

Использование ГИС в природоохранной деятельности носит определенную направленность. В ходе экологического наблюдения (мониторинга) осуществляется сбор и совместная обработка данных, относящихся к различным природным средам, моделирование и анализ экологических процессов и тенденций их развития, а также использование данных при принятии решений по управлению качеством окружающей среды. То есть, в природоохранной деятельности ГИС являются мощным средством поддержки принятия управленческих решений и могут быть использованы при обучении вопросам экологического менеджмента.

Результат экологического исследования, как правило, представляет оперативные данные следующих типов: **констатирующие** (измеренные или смоделированные параметры состояния экологической обстановки в момент обследования), **оценочные** (результаты обработки измерений и получение на этой основе оценок экологической ситуации), **прогнозные** (прогнозирующие развитие обстановки на заданный период времени). Отсюда следует, что в ГИС природоохранной направленности применяют, прежде всего, динамические модели. В силу этого в них большую роль играют технологии создания электронных карт. Совокупность всех трех перечисленных видов данных составляет основу экологического мониторинга. Особенностью представления данных в системах экологического мониторинга является то, что на экологических картах в большей степени представлены ареальные геобъекты (например, области с одинаковой концентрацией загрязнителя), чем линейные.

На уровне сбора данных наряду с топографическими характеристиками дополнительно определяются параметры, характеризующие экологическую обстановку. Это увеличивает объем атрибутивных данных в природоохранных ГИС по сравнению с типовыми. На уровне моделирования используют специальные методы расчета параметров, характеризующих экологическое состояние среды и определяющих форму представления цифровых карт. На уровне представления при экологических исследованиях осуществляют выдачу не одной, а, как правило, серии карт, особенно при прогнозировании явлений и последствий. В некоторых случаях карты выдаются с применением методов динамической визуализации.

Так, в настоящее время предлагается целый ряд специализированных программ для профессиональной деятельности в области охраны окружающей среды, реализующих элементы технологии ГИС. Примером может служить программный комплекс Zone (АО Ленэкософт). Он предназначен для оценки загрязнений и их последствий и привязки результатов на местности. Основой такой программы является математическая модель процесса. Так, в комплексе Zone использован метод расчета загрязнения атмосферы, базирующийся на гидродинамической модели пограничных слоев атмосферы и методе Монте-Карло для оценки турбулентной диффузии примесей. Применение стандартизованного метода расчета (ОНД-86) позволяет при-

менять полученные результаты для принятия управленческих решений. На основе данных об источнике загрязнения (геопро пространственная привязка, объем, скорость выброса и др.), климатических характеристиках рассчитывается поле загрязнения, и результаты визуализируются с учетом пространственных координат. На основе суперпозиции полей загрязнений рассчитывается суммарное загрязнение и риск токсических эффектов.

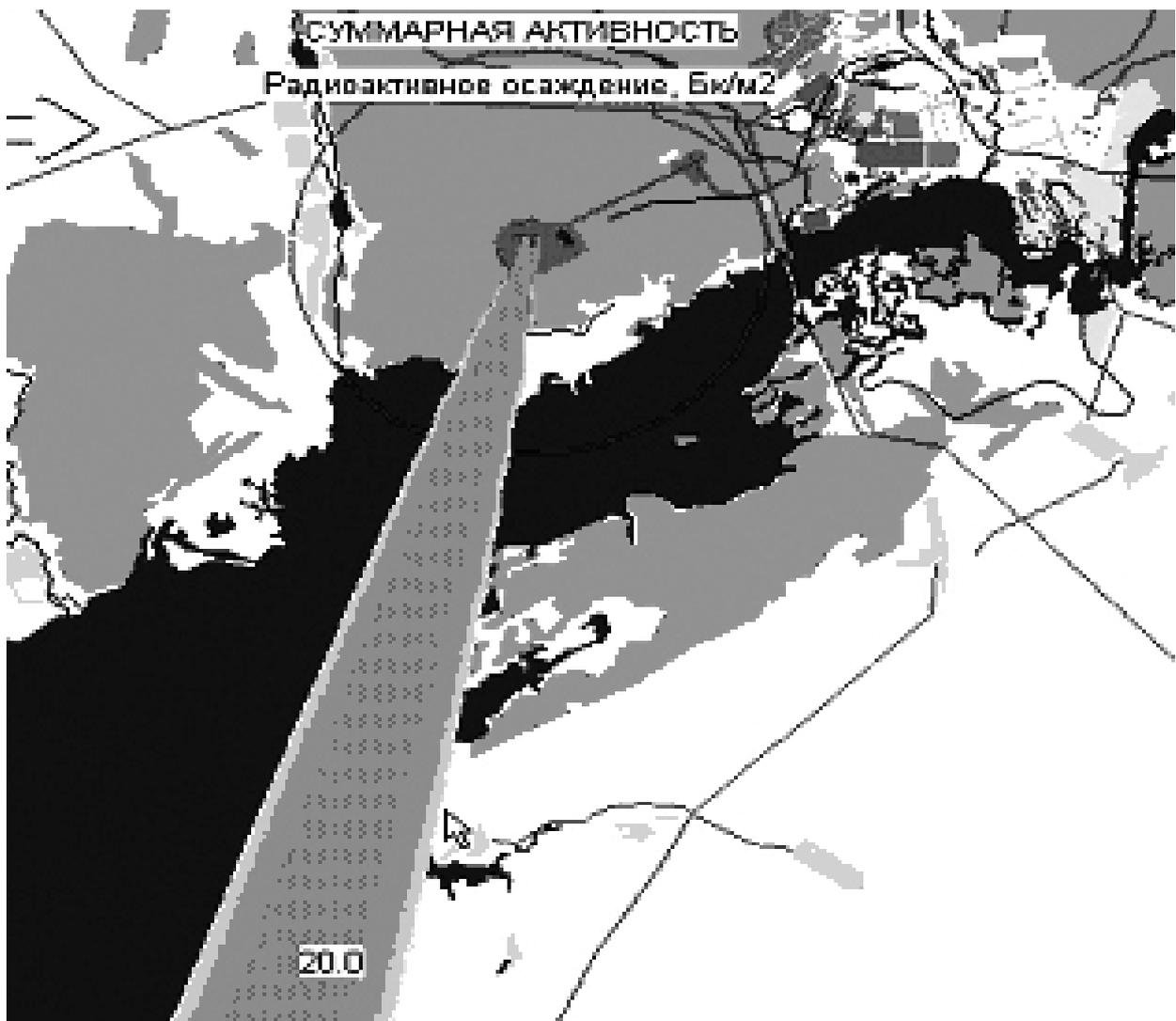


Рис. 1.6. Результаты расчета комплексом Zone факела загрязнения при выбросе радионуклидов

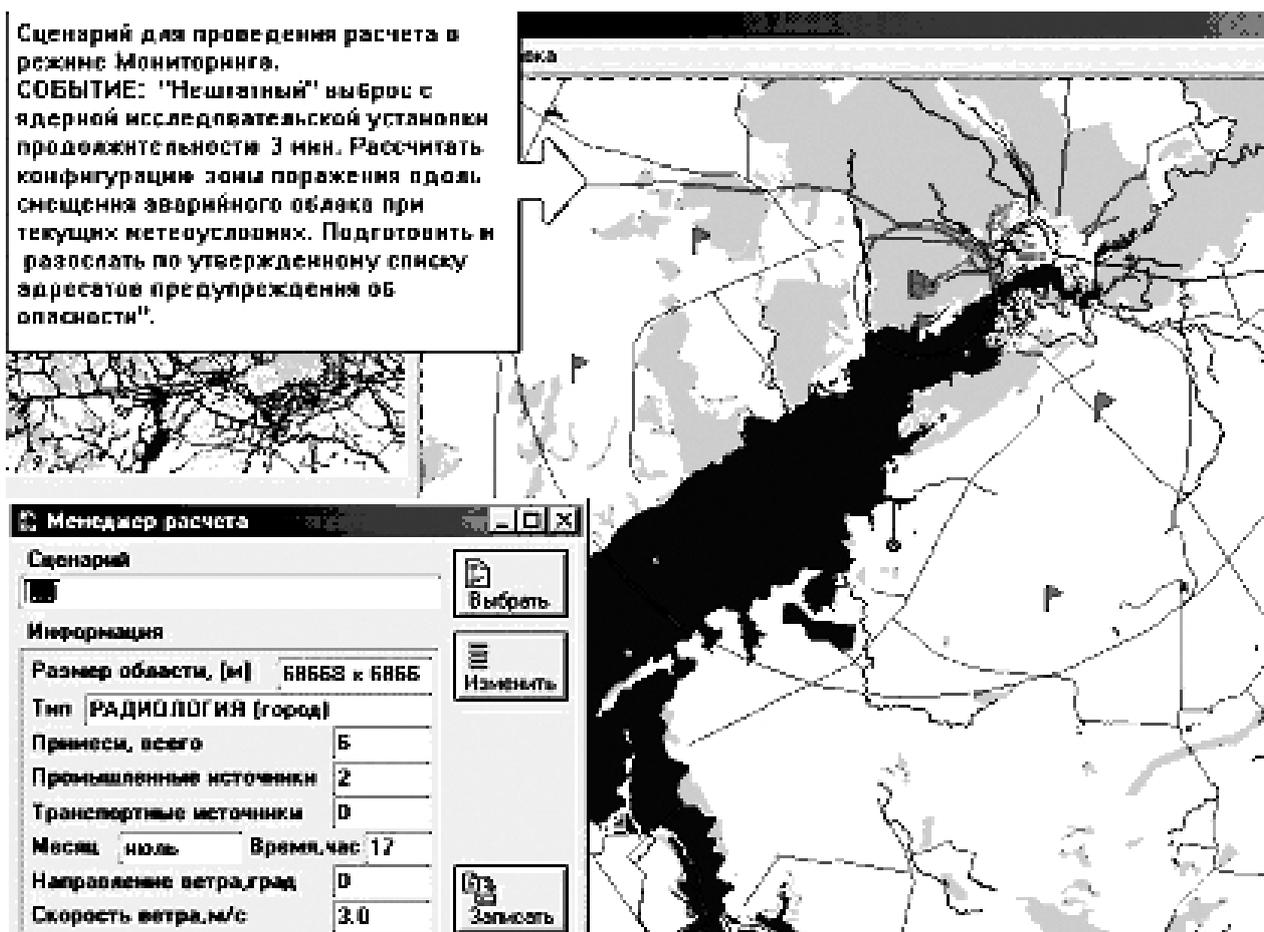


Рис. 1.7. Моделирование радиоактивного выброса с использованием комплекса Zone

Другим примером программ экологической направленности может служить серия программных комплексов “Кедр” (НПП “Логус”). Это инструмент для создания единой системы контроля и управления природоохранной деятельностью как для предприятия, так и для территориальных органов Министерства природных ресурсов РФ. Взаимодействие с расчетными комплексами, например, “Призма”, позволяет проводить расчет количественных показателей загрязнений. Так, унифицированная программа расчета загрязнений атмосферы реализует “Методику расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий” (ОНД-86). Существенное значение для обеспечения наглядности информации природоохранного характера имеют ГИС, отображающие на карте характер распределения загрязнений. Для реализации таких возможностей в комплексе имеются модули, обеспечивающие передачу информации из программы “Призма” в ArcView, САПР AutoCAD, а

также прием графических файлов топоосновы местности в комплекс “Призма”.

Особенностью указанных программ является их высокая наглядность. Они служат эффективными симуляторами техногенных катастроф с визуализацией результатов загрязнения. Следует отметить возможность применения в учебном процессе даже демо-версий этих программ.

Весьма существенной является возможность интерактивной работы с выбранными моделями, что создает основу виртуального практикума. Следует также отметить применение основных визуализированных объектов и явлений в контрольно-тестовом блоке, что позволяет осуществлять контроль и самоконтроль знаний.

Как уже сказано, компьютерные модели могут также быть основой виртуального практикума в ряде разделов химии и биологии. В значительной степени это касается курсов, связанных с современными приборными методами исследований. Большинство современных приборов, например, для физико-химических исследований, снабжены компьютерами, с помощью которых задаются исходные данные, происходит фиксация результатов измерений, их обработка и представление. Таким образом, обучаемый получает навыки работы, используя виртуальный прибор, имеющий интерфейс, сходный с компьютерным интерфейсом реального прибора. Могут быть промоделированы процессы исследований широких рядов химических и биологических объектов. Примером тому служат многочисленные компьютерные программы, эмулирующие модель процесса потенциометрического титрования. Имеется широкий набор виртуальных реактивов, работая с которыми обучаемый может варьировать их количество и концентрации и получать в итоге конечный график.

Также современные полярографические приборы представляют собой комплекс из датчика и «виртуального полярографа». Последний – это программный продукт, ориентированный на обработку соответствующего сигнала и на визуализацию результатов. Соответственно эта программа может симулировать реальный полярографический процесс и быть использована для обучения.

Однако следует повториться, что данный подход не может заменить реальных лабораторных занятий, дающих навык работы с реальными объектами.

Существенным достоинством компьютерных моделей является бесспорная целесообразность их применения при рассмотрении взрыво- и пожароопасных процессов, реакций с участием высокотоксичных веществ, радиоактивных препаратов – всего, что представляет непосредственную опасность для здоровья обучаемого.

Несомненную ценность для высшего образования представляют многочисленные электронные справочники и базы данных научных и учебных материалов, которые на сегодняшний день накоплены в каждом вузе.

1.6. Электронные обучающие системы на основе Интернет-технологий в школьном образовании

Перейдем к рассмотрению электронных образовательных средств, ориентированных на работу в режиме удаленного доступа. Прежде всего следует отметить несомненную ценность для учебного процесса многочисленных химических баз данных (набор ссылок представлен на сайте ChemNet), биологических коллекций, экологических сведений, поддерживаемых ведущими научными, учебными и специализированными организациями. Не имеет особого смысла представлять в рамках настоящего пособия набор ссылок на соответствующие ресурсы. Они достаточно легко могут быть найдены с использованием поисковых систем ЯНДЕКС, РАМБЛЕР и др.

Рассмотрим русскоязычные обучающие системы, предназначенные для работы в режиме удаленного доступа. Ряд вузов поддерживают Интернет-учебники химической, биологической и экологической тематики, которые могут быть использованы в учебном процессе в режиме удаленного доступа.

Интерактивный мультимедиа Интернет-учебник «Базовые разделы биологии» разработан в НовГУ им. Ярослава Мудрого (www.mediaterra.ru/project/biology/index.htm). В учебнике можно найти ответы на многие вопросы по ботанике и зоологии, которые предусмотрены государственным стандартом Российской Федерации для средней школы. Школьники и абитуриенты могут ознакомиться с толкованиями терминов в глоссарии, при помощи тестов проверить свои знания различных разделов предмета. Представлена информация

о вкладе отечественных и зарубежных ученых в развитии биологии. Отличительной особенностью пособия является возможность интерактивного "общения". Если в материалах ресурса ответ на нужный вопрос отсутствует, пользователь может задать его в разделе "Справочное бюро" и при следующем посещении познакомиться с ответом.

Учебный комплекс Самарского государственного аэрокосмического университета "ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ" для средней школы предназначен для более эффективного изучения этой дисциплины с использованием современных информационных технологий обучения (<http://cnit.ssau.ru/organics/index.htm>). Он разработан на основе технологии КАДИС (системы Комплексов Автоматизированных Дидактических Средств) в Центре новых информационных технологий Самарского государственного аэрокосмического университета (ЦНИТ СГАУ) сотрудниками центра, преподавателями кафедры органической химии Самарского государственного университета (СамГУ).

2.4. Амины

Анилин (фениламин, аминабензол) $C_6H_5NH_2$ – важнейший из промышленных аминов:

Он находит широкое применение в качестве полупродукта в производстве красителей, взрывчатых веществ и лекарственных средств (сульфаниламидные препараты).

Анилин представляет собой бесцветную маслянистую жидкость с характерным запахом, т. кип. $184^\circ C$, т. пл. $-6^\circ C$. Ядовит.

Для аминамина характерны реакции как по аминогруппе, так и по бензольному кольцу. Особенности этих реакций обусловлены

Рис. 1.8. Фрагмент электронного учебника «Органическая химия», поддерживаемого в режиме удаленного доступа СамГУ

Знание основ органической химии, дающей научное обоснование строения и функционирования живых организмов, производства и грамотного применения различных материалов и изделий, является важным элементом в подготовке человека к жизни в современном обществе. При изучении этого раздела химии, как одного из наиболее сложных, целесообразно применение современных технологий обучения. К сожалению, процесс освоения органической химии в средней школе подкрепляется в основном учебной литературой, а современные информационные технологии используются в этих целях довольно редко.

Кроме того, в типовых школьных учебниках содержание органической химии рассматривается преимущественно на феноменологическом уровне, что не способствует пониманию сути описываемых явлений, вынуждает учащихся прибегать к механическому заучиванию учебного материала. Следует также отметить, что основные теоретические положения органической химии, усвоение которых помогает ее осознанному изучению, в большинстве обычных (бумажных) учебников излагаются не в виде единой логической последовательности, а разрозненно – при описании отдельных классов органических соединений. Часто это приводит к тому, что общетеоретические положения воспринимаются учащимися, как частные случаи. Поэтому в данном электронном учебнике теоретические основы органической химии обобщены в первой его части "Введение в органическую химию". Здесь же рассматривается ряд понятий, изучаемых в 8 и 9 классах (электронное строение атома, химическая связь, химическая реакция и т.п.), на которые необходимо опираться при освоении нового материала. Успех в изучении органической химии во многом зависит от формирования образных представлений о химическом, электронном и пространственном строении органических молекул и его влиянии на свойства вещества. Именно поэтому, учебные тексты данного учебника сопровождаются большим количеством графических иллюстраций и анимации, в том числе трехмерных. Понимание особенностей строения вещества позволяет ученику прогнозировать его химические и физические свойства.

В целом содержание учебника соответствует образовательному стандарту средней школы, а по глубине и обоснованию основных положений органической химии несколько выходит за его рамки. Учеб-

ник может быть полезен учащимся и преподавателям химии средних школ, абитуриентам и студентам младших курсов вузов. Данный электронный учебник является частью более обширного комплекса по органической химии, в состав которого входят различные компоненты. Общий объем Интернет-версии учебника – 9,5 Мбайта, количество графических иллюстраций – 470, анимаций – 60, виртуальных моделей и анимаций (в формате VRML) – более 30, flash-иллюстраций – около 20, контрольных вопросов и задач – 150. Этот учебник разработан в рамках проекта "Разработка комплекса методических, программно-информационных и мультимедиа учебных средств (на CD ROM) по органической химии для средней школы" по программе Министерства образования РФ "Научное, научно-методическое, материально-техническое и информационное обеспечение системы образования" (2000 г.).

Интересные разработки по школьному биологическому образованию представлены А.Г. Козленко (<http://www.kozlenkoa.narod.ru/index.htm>). Грамотное информационное наполнение, приятный интерфейс, система контрольных заданий.

На личной странице автора представлен актуализированный список ссылок на информационные и программные продукты, доступные через Интернет и полезные в процессе преподавания школьной биологии.

Следует отметить Интернет ресурсы по биологии и экологии, поддерживаемые в г. Переславле-Залесском на сервере *uchcom. botik.ru*, **Виртуальный Музей Природы** (<http://uchcom.botik.ru/nature/>).

Факультативный учебный курс "Изучение природы и истории родного края" в течение нескольких лет апробирован на базе Интернет-класса межшкольного учебно-производственного центра города Переславля-Залесского. Курс базируется на материалах естественно-исторического отдела Переславля-Залесского историко-архитектурного и художественного музея-заповедника. Виртуальный Музей Природы края содержит информацию о животном и растительном мире региона. Кроме того, на сайте собрана уникальная информация об истории становления научно-исследовательских обществ в Переславле-Залесском в послереволюционные годы.

Тема "Классификация белков"



Для работы с этим ресурсом Вам понадобится программа RasMol. Если Вы этого еще не сделали, ее можно скачать и установить [отсюда](#).

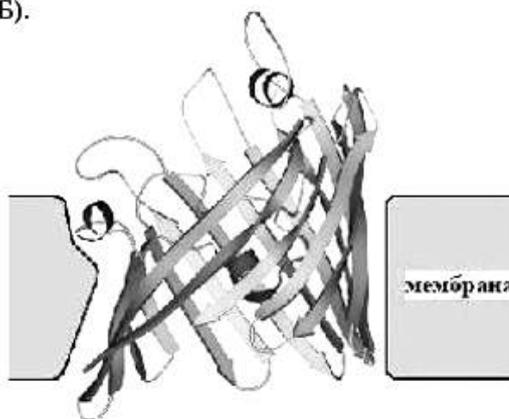


Версию для Windows можно скачать и с этого ресурса:

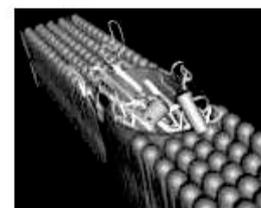
[raswin.exe](#) "RasMol V2.5 Molecular Visualisation Program" - программа визуализации молекул (341 кБ).

[Raswin.hlp](#) "Help" - руководство для пользователей (62,5 кБ).

Мембранные : Также имеют молекулу в виде шарика (глобулы) и хорошо выраженную третичную структуру, но не растворимы в воде за счет гидрофобных участков, взаимодействующих с липидами мембран, выполняют транспортную (сквозь мембрану) и сигнальную функции (*порин - рис., родопсин*)



Трехмерную модель расположения порина в плазматической мембране бактерии можно скачать, кликнув по названию файла ([porin.mpg, 3,4 Мб](#)) или рисунку справа, с сайта <http://www.proinformatix.com/movies.html>, на котором также можно найти и другие анимации с моделями белков.



Вопрос В. Как можно по расположению аминокислот, входящих состав белка, отличить мембранный белок

от глобулярного? Сделаем это на конкретном примере: рассмотрите белки  и . Какой из этих белков мембранный, а какой - глобулярный? Проиллюстрируйте ответ рисунками.

Рис. 1.9. Фрагменты образовательных ресурсов по биологии

Виртуальный Музей организует для школьников специальный проект, в рамках которого они самостоятельно ведут фенологические наблюдения. Сайт естественноисторического отдела открылся сравнительно недавно. Однако на его базе уже были организованы учебные занятия учеников межшкольного учебно-производственного центра. Школьники не только изучают материалы сайта, но и активно

участвуют в его развитии – ищут в сети родственные материалы, работают с литературой, сканируют фотографии, карты и рисунки. Проект "Природа Переславского края" развивается в рамках общегородской деятельности по наполнению информационного пространства телекоммуникационной сети «Ботик» города Переславля-Залесского.

Главным образом, материалы сайта ориентированы на использование в факультативном курсе «Краеведение Переславского района» для 8 – 9 классов общеобразовательной школы. Отдельные его части могут быть использованы в курсах «Общая экология» для 9-х классов, «Человек и природа в фольклоре» для 5-6 классов, рекомендованных Советом по экологическому образованию при Президиуме Российской академии образования.

Курс школьного краеведения, который в настоящее время преподается факультативно только немногими учителями, является важной формой мировоззренческого, нравственного, экологического и эстетического воспитания. Одной из серьезных проблем учителей в организации курса краеведения является дефицит достоверной научной и доступной информации по краеведению, поскольку до сих пор не существует даже современного учебника по этому предмету для средних школ. Авторы сайта «Природа Переславского края» считают своей задачей восполнение дефицита информации по краеведению средствами сетевых технологий. Сейчас на сайте «Природа Переславского края» размещены материалы об истории естественнонаучных исследований в Переславском районе и известных краеведах, о географическом положении района с картами и фотографиями характерных ландшафтов; уникальные материалы по фенологии Переславля-Залесского, в которых можно найти не только результаты систематических наблюдений, проводившихся в нашем веке, но и данные об известных зафиксированных в исторических документах фенологических явлениях, начиная с XVII века. На сайте опубликована научная информация об уникальном памятнике природы, озере Плещеево, в которой отражены данные исследований озера учеными Института внутренних вод РАН.

По материалам сайта «Природа Переславского края» рекомендуется проводить уроки по следующим темам:

1. История естественнонаучных исследований в Переславском районе. Переславские краеведы. Переславль-Залесское научно-просветительское общество – ПЕЗАНПРОБ (2 часа).

2. Физико-географическая характеристика Переславского района, географические координаты крайних точек территории края, протяженность территории с севера на юг и с запада на восток, сравнительные данные о величине территории района (1 час).

3. Природные зоны и ландшафты в пределах Переславского района (1 час).

4. Водные ресурсы района. Внутренние воды. Важнейшие озера, реки и болота (1 час).

5. Климат. Факторы, определяющие особенности климата. Воздушные массы, формирующие климат района. Климатические сезоны. Влияние климата на земледелие, агроклиматические ресурсы района (1 час).

6. Плещеево озеро – уникальный гидрологический памятник природы (1 час).

7. Вода как среда обитания животных. Приспособления животных к жизни в воде. Рыбы озера Плещеево (1 час).

8. Растения водоемов (1 час).

9. Предмет фенологии и основные фенологические понятия. Значение фенологии для практической деятельности людей. Материалы по фенологии Переславля-Залесского (1 час).

10. Сезонные изменения в жизни растений (1 час).

11. Народный календарь, как отражение отношения человека прошлого к окружающему миру. Народный календарь, как колыбель естествознания (1 час).

Виртуальная Пустынь (Интернет-технологии в экологическом образовании <http://www.uic.nnov.ru/pustyn/>).

Представленная в рамках ресурса информация была использована для организации учебных курсов для членов неправительственных природоохранных организаций. Наиболее важные особенности этого проекта связаны с тем, что он, с самого начала, носил межрегиональный характер, и его создание было инициировано неправительственными организациями. Начало проекта было связано с проведением экологических школ для учеников из Нижегородской, Владимирской и Ярославской области. Сервер проекта включает перечень материа-

лов учебной программы, видеоотчеты с экскурсий, самостоятельные учебные работы школьников (как правило, гипертекстовые определители растений и животных), персональные странички всех участников школы. Практически все компоненты учебного процесса находят свое виртуальное отражение. Развитие проекта происходит уже более пяти лет. Это позволяет проследивать историю педагогического коллектива и тех мест, где проходят школы, сохранять преемственность учебной и творческой деятельности.

Структура ресурса и некоторые фрагменты представлены на соответствующих рисунках.

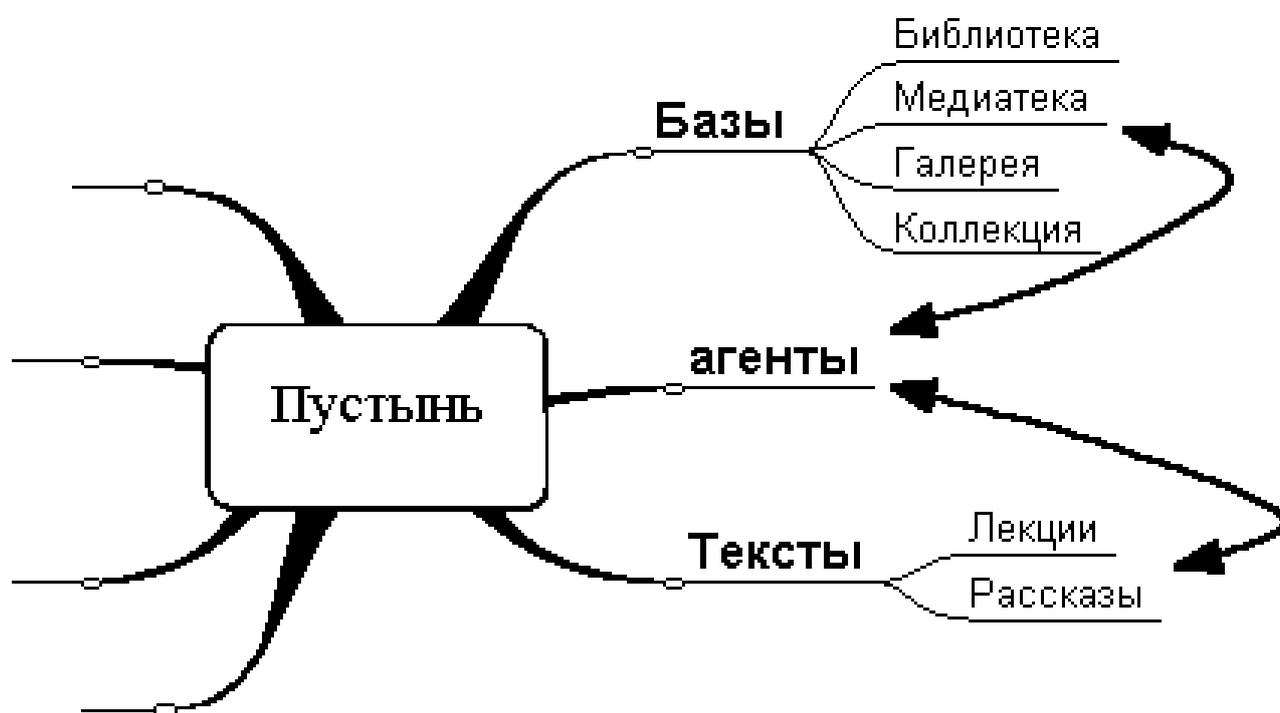


Рис. 1.10. Структура образовательного ресурса "Виртуальная пустынь"

Взаимодействие государственного и неправительственного секторов, происходящее в рамках проекта, оказывает серьезное влияние не только на экологическое образование России, но и на развитие информационной культуры.

Необходимо отметить и коммерческие проекты в развитии химического, биологического и экологического образования в России.

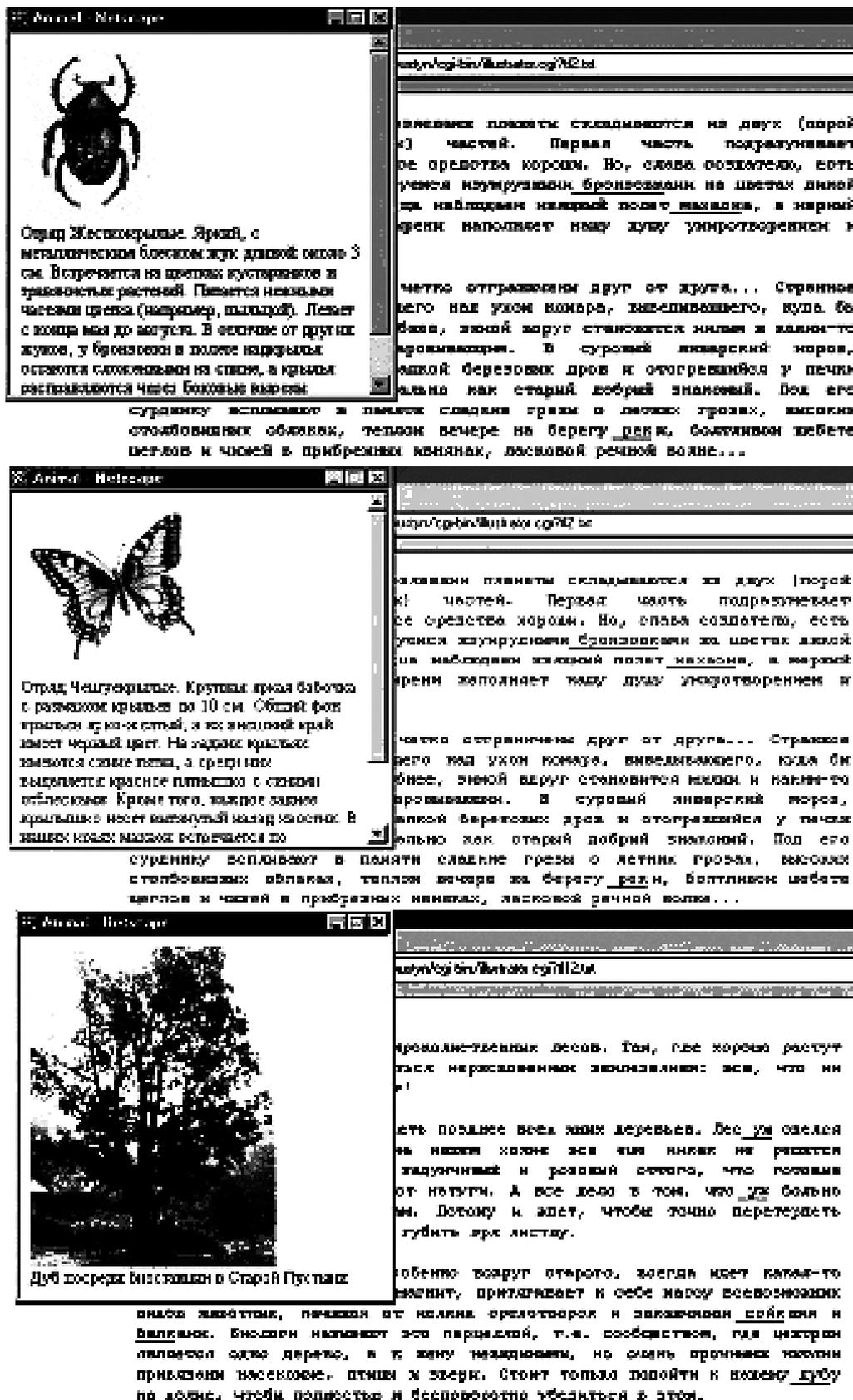


Рис. 1.11. Фрагменты образовательного ресурса "Виртуальная пустынь"

Компания ФИЗИКОН (<http://www.physicon.ru/index.html>) – известный российский разработчик учебных мультимедийных компьютерных программ и Internet-систем дистанционного обучения в области естественных наук (математика, физика, астрономия, химия и другие). Компания выполняет разработки образовательного программного обеспечения по заказам организаций. Она участвует в ряде международных проектов по разработке образовательного и учебного программного обеспечения, как на компакт-дисках, так и для Internet/Intranet. ФИЗИКОН является членом международной группы Open Teach Group, занимающейся разработкой новейших учебных и образовательных программных систем и технологий.

"Открытый Колледж" (www.college.ru) – Internet-проект дополнительного образования, разрабатываемый компанией ФИЗИКОН. Он включает школьные курсы (математика, физика, астрономия, химия, биология и другие предметы) и курсы для профессионального образования. Содержит более 4000 тестовых вопросов и большое число интерактивных моделей.

Компания ФИЗИКОН разработала ряд учебных и образовательных продуктов и проектов.

Открытая Химия 2.5. Сюда входят следующие разделы:

- * Общая и органическая химия
- * Физическая химия и химическая кинетика
- * Химия элементов
- * Химия окружающей среды
- * Биохимия

Автор курса – заведующий кафедрой общей химии МФТИ, доктор химических наук, профессор В.В. Зеленцов.

Курс включает:

- учебник с большим количеством справочного материала;
- 58 интерактивных учебных моделей и анимаций;
- более 100 графиков и схем;
- более 150 задач с решениями и 300 контрольных вопросов;
- трехмерный визуализатор графических формул;
- журнал учета работы ученика;
- интерактивная таблица Менделеева;
- каталог Интернет-ресурсов по химии;
- звуковое сопровождение.

Содержание курса соответствует программе курса химии для общеобразовательных учреждений России и включает большое количество дополнительного материала. В учебнике приведены справочные таблицы, дается подробный разбор типовых задач, представлен большой набор для самостоятельного решения.



Рис. 1.12. Фрагменты образовательного ресурса "Открытый Колледж"

Курс "Открытая Биология 2.5" предназначен для учащихся общеобразовательных учреждений – средних школ, лицеев, гимназий, колледжей. Он может быть использован для самостоятельного изучения биологии и подготовки в вузы, а также будет полезен студентам педагогических вузов и преподавателям биологии.

Иллюстрированный учебник содержит:

- 60 интерактивных учебных моделей;
- более 500 фотографий, рисунков и схем;
- 400 контрольных вопросов для проверки знаний;
- систематику органического мира;
- "Атлас человека";
- поисковую систему;
- сертификационный тест;
- справочные материалы, биографии биологов;
- журнал достижений обучаемого;
- каталог Интернет-ресурсов по биологии.

СПИСОК ИНТЕРАКТИВНЫХ МОДЕЛЕЙ

- Систематика организмов
- Малярия
- Крапива
- Развитие побега из почки
- Годичные кольца
- Распространение семян
- Танец пчелы
- Бабочки
- Жизненный цикл лягушки
- Мышечные сокращения
- Близорукость и дальновидность
- Пищеварение
- Дыхание
- Атлас человека
- Анализ крови
- Транскрипция РНК
- Ферментативный катализ

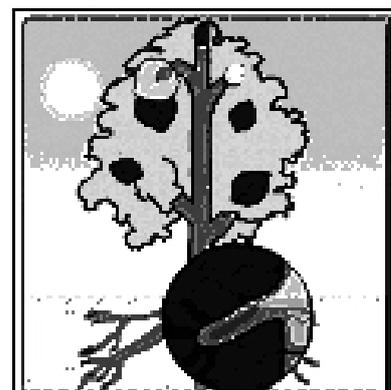
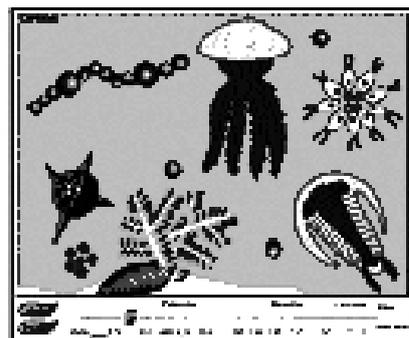


Рис. 1.13. Фрагменты курса «Открытая биология»

1.7. Электронные обучающие системы на основе Интернет-технологий в высшем образовании

При достаточно широком распространении учебных электронных и, в частности, Интернет ресурсов по химии, биологии и экологии в школьном образовании, информационное наполнение для вузов в режиме удаленного доступа представлено намного более слабо. В основном, электронные обучающие системы сконцентрированы в локальных компьютерах и корпоративных сетях. Примеры открытых образовательных курсов весьма немногочисленны и ограничены по содержанию.

Как указывалось выше, **Тульский государственный университет** на сайте системы дистанционного обучения *burma.tsu.tula.ru:7777/* поддерживает в режиме удаленного доступа сопровождающую информацию и контрольные задания для целого ряда инженерных и естественнонаучных специальностей и дисциплин.

Алтайский государственный университет поддерживает информационные материалы по дисциплине "Теоретические основы органической химии" (*http://www.dcn-asu.ru/structure/chemistry/org/tooc/index.html*), которая является специальным курсом для студентов четвертого курса химического факультета в восьмом семестре в соответствии с государственным стандартом специализаций "Органическая химия" и "Химическая технология".

Большинство материалов носит справочный, информативный характер, либо представляет собой научные и методические публикации.

Отсюда следует, что несомненной ценностью для современного образования является создание фонда химических и биологических процессов и явлений.

В рамках выполнения программы "Создание системы открытого образования" (подпрограмма «Научное, научно-методическое и информационное обеспечение создания системы открытого образования») в **Ярославском государственном университете им. П.Г. Демидова** был создан виртуальный фонд биологических, химических, биохимических эффектов и явлений, доступный через Интернет с помощью стандартных web-браузеров (*www.uniyar.ac.ru/projects/open-*

du/effects/ и *yaroslavl.opened.ru*). Отбор эффектов и явлений осуществлялся, исходя из дидактических принципов открытого образования, позволяющих обеспечить максимальную эффективность указанной формы учебного процесса. Были выбраны группы взаимосвязанных эффектов, что обеспечивает обучаемым усвоение как целых блоков основополагающих понятий химии и биологии, так и отдельных тем.

Был произведен отбор 75 эффектов и явлений в области химии (вопросы химического равновесия и химические эффекты, связанные с равновесными процессами, химия групп элементов) и 75 эффектов в области биологии и биохимии (мембранные и др. эффекты клетки). Указанные разделы, являясь одними из основополагающих в химии и биологии, достаточно сложны.

Таблица 1.1

Отобранные эффекты и явления в области химии

Изменение концентраций реагирующих веществ при равновесном процессе	Смещение химического равновесия при изменении концентрации исходных веществ
Структура и химическая связь.	Распределение электронов в кристалле металла и химическая связь.
Влияние изменения концентраций реагирующих веществ на сдвиг химического равновесия.	Растворение как физико-химический процесс.
Условия смещения химического равновесия под воздействием температуры	Электрохимическая коррозия металлов
Равновесие в реакции этерификации	Химическая коррозия металлов
Природа химической связи в металлах	Электролиз растворов солей
Изменение энтальпии при растворении веществ	Сравнительный электролиз растворов сульфата и хлорида меди

Зависимость процесса растворения от температуры.	Доказательство продуктов электролиза раствора иодида калия
Схемы составления полуреакции окислительно-восстановительных процессов	Взаимосвязь окраски соединений переходных элементов с их строением
Взаимодействие между металлом и кислотой.	Особенности строения переходных элементов и химические свойства простых веществ
Процесс взаимодействия магния с одноосновными кислотами (сильные и слабые).	Восстановление меди из ее оксида водородом
Гидролиз как равновесный процесс.	Электролитическая диссоциация.
Окислительно-восстановительные реакции	Тестовые окислители и восстановители
Окисление и восстановление.	Термодинамические условия устойчивости вещества
Стандартные электродные потенциалы.	Построение энергетического цикла и расчет энергии кристаллической решетки
Возможность протекания окислительно-восстановительного процесса	Возможность образования водородной связи и влияние ее на свойства веществ
Восстановительные свойства металлов по отношению к катионам металла.	Свойства атомной (ковалентной) связи
Прогнозирование и осуществление О-В процессов, происходящих в растворах, содержащих катионы водорода и металлы.	Электроотрицательность, поляризуемость и поляризирующее действие ионов и влияние их на образование ионной и ковалентной связи
Реакция нейтрализации	Сильные и слабые электролиты
Совместный необратимый гидролиз.	Влияние электронного строения на изменение свойств

Смещение равновесия при гидролизе солей	Зависимость свойств от строения молекулы
Изменение энергии при окислительно-восстановительных процессах	Взаимосвязь агрегатного состояния и металлических свойств
Действие буферного раствора	Степень гидролиза
Образование малорастворимого электролита	Диспропорционирование хлора в воде
Растворение осадков	Растворимость галогенидов в воде
Образование комплексных соединений	Электролиз раствора хлорида натрия
Разрушение комплексного соединения	Кислоты и основания
Взаимодействие хлора и брома с фосфором	Взаимодействие хлороводорода с водой
Восстановительные свойства хлороводорода	Обесцвечивающие свойства хлора и брома
Взаимодействие брома с раствором аммиака	Влияние анионов и катионов на растворимость галогенидов в воде
Строение и свойства кислородсодержащих кислот хлора	Неустойчивость гипохлоритов при нагревании
Взаимодействие галогенидов калия с серной кислотой	Способность галогенидов к комплексообразованию
Невозможность взаимодействия хлората калия с серной кислотой	Влияние сил внутри молекулы галогеноводорода на его свойства
Зависимость растворимости газа в воде от температуры	

***Отобранные эффекты и явления
в области биологии и биохимии***

Транскрипция генетического материала ядра	Процесс созревания и РНК
Перенос молекул через ядерную пору	Транскрипция и процессинг РНК
Влияние на транскрипцию и процессинг окружающей среды	Трансляция как процесс, перенесения нуклеотидной последовательности РНК в последовательность аминокислот в белке
Трансляция	Сборка полипептидной цепи
Посттрансляционная модификация	Образование субъединиц рибосом
Трансляция кода РНК и сборка полипептидов	Строение клеточной мембраны
Поверхностный аппарат	Барьерная функция липидов
Проведении нервного импульса	Рецепторная функция липидов
Изменение количественных показателей гликолипидов в клетке	Изменение жидкостности мембраны
Участие липидов в адаптогенезе	Асимметрия мембран
Изменение функции мембраны при недостатке определенных липидов	Нарушение структуры и функции мембраны
Систематические особенности (прокариоты) строения мембраны	Выполнение белками мембран рецепторных функций
Функция протонной помпы	Облегченная диффузия
Работа К-На насосов	Адгезия
Промежуточный контакт	Десмосома
Полудесмосома	Плотный контакт
Коммуникационные контакты (щелевой)	Коммуникационные контакты (синапс)
Транспорт белка	Изменение концентрации ионов кальция в цитоплазме

Ионы кальция как регулятор взаимодействия клеток с окружающей средой	Механизм высвобождения кальция
Сопряжение окисления и фосфорилирования	Теплопродукция митохондрий
Происхождение митохондрий	Мембраны митохондрий
Митохондрия. Фосфорилирование	Разобщение окислительного фосфорилирования в митохондриях
Влияние среды на синтез рРНК в ядрышке	Роль ядрышка в образовании субъединиц рибосом
Синтез рРНК в ядрышке	Комплекс Гольджи
Лизосомы	Окаймленные пузырьки
Микротрубочки как структуры поддержания формы и осуществления транспорта в клетке	Промежуточные нити как часть цитоскелета
Участие цитоскелета в экзоцитозе	Экзоцитоз, опосредованный ионами кальция (1)
Экзоцитоз, опосредованный ионами кальция (2)	Экзоцитоз, опосредованный интегральными белками
Коммуникация клеток	Ганглиозиды – маркеры клеток
Диффузия малых молекул через плазматическую мембрану	Транспорт веществ в клетку
Участие ферментов во внеклеточном переваривании	Рецепция физических факторов белками
Особенность сахарозо-изомальтазного комплекса белков мембраны, выполняющих ферментативные функции	Трансформация внешних сигналов во внутренние с помощью белков-рецепторов
Запрограммированная гибель клеток	Гибель клеток, выполнивших свою функцию
Доза тератогена	Генетическая конституция матери
Инфекционные агенты	Эффекты медпрепаратов
Метаболизм матери	

Разработки ориентированы как на среднее, так и на высшее естественнонаучное образование.

Существенным аспектом работы явилось представление отобранных эффектов и явлений в электронной информационно-образовательной среде. Способ и структура представления в значительной степени определяют эффективность учебного процесса. Следует отметить, что наиболее эффективным в указанных целях является представление понятий и явлений в различных областях химии и биологии при помощи **визуализированных моделей**. Отсюда встает проблема выбора моделей объектов и явлений и способов их визуализации. Разумным является сочетание статичных изображений объектов, анимационных и отцифрованных видеофрагментов процессов и процедур и представление явлений в форме моделей с эффективной визуализацией (в частности, технологии, основанные на Flash, технологии Real Media). Весьма существенной является возможность интерактивной работы с выбранными моделями в режиме удаленного доступа, что создает основу виртуального практикума. Следует также отметить применение основных визуализированных объектов и явлений в контрольно-тестовом блоке, что позволяет осуществлять контроль и самоконтроль знаний обучаемого в режиме теледоступа.

Поэтому, в дополнение к текстовой части описания эффектов, согласно структуре представления информации, прилагается их анимационная визуализация, основанная на Flash. Так на рисунке представлен фрагмент анимационного ролика, иллюстрирующего равновесные процессы.

Применение подобной технологии особенно эффективно при удаленном доступе, поскольку небольшие размеры файлов способствуют быстрдействию системы при умеренной пропускной способности телекоммуникационных каналов.

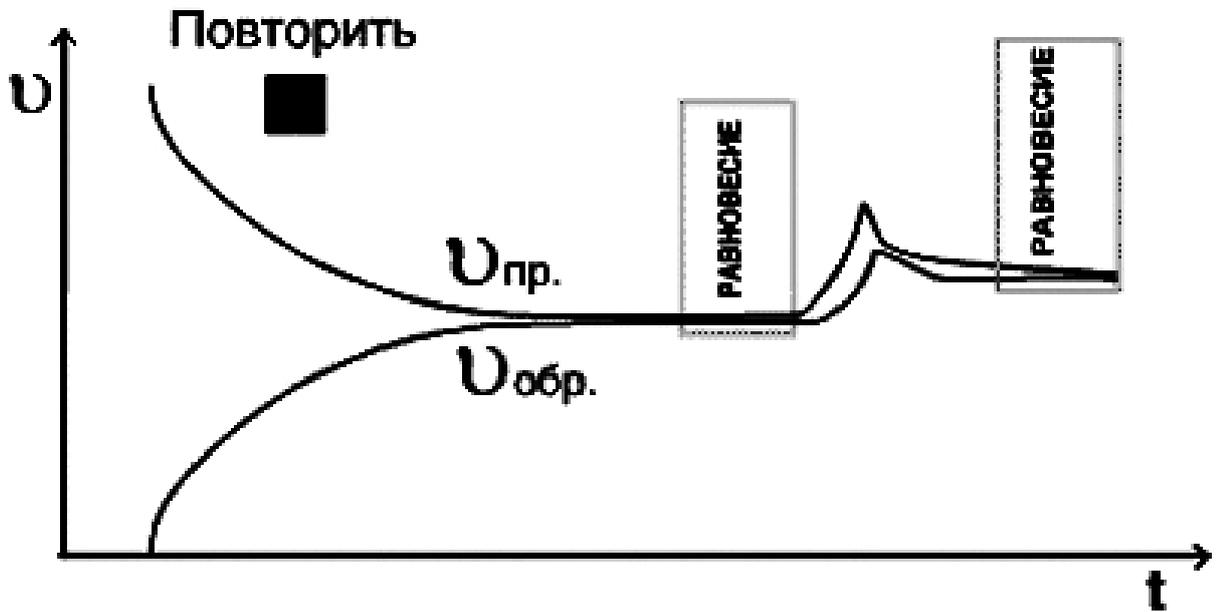
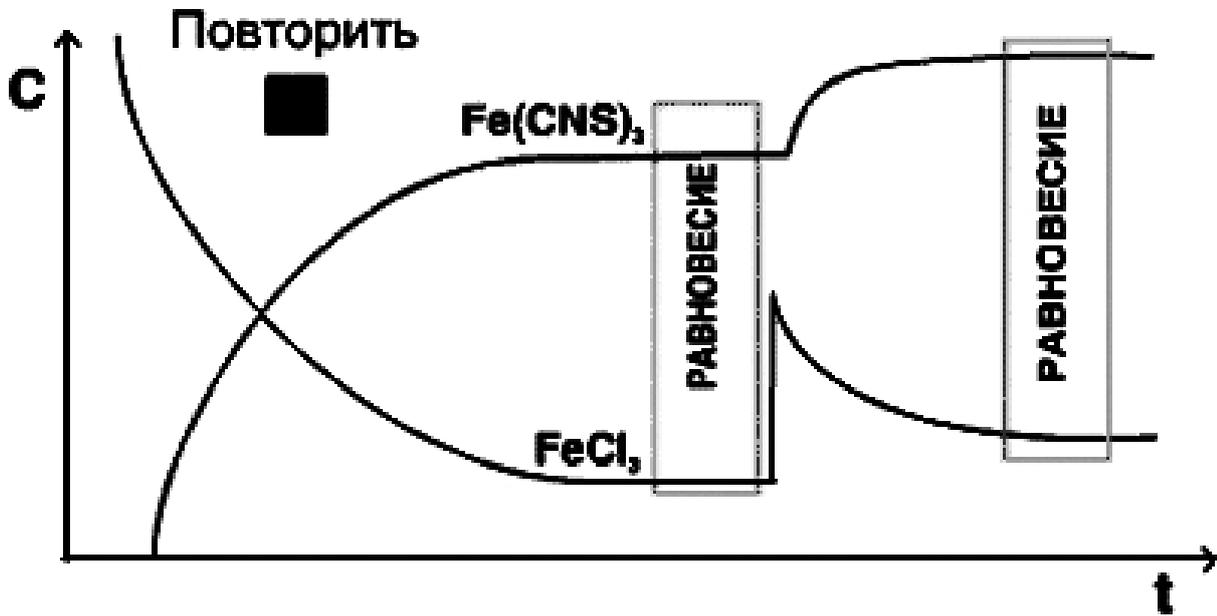


Рис. 1.14. Фрагмент анимации эффекта "Смещение химического равновесия при изменении концентрации исходных веществ"

наружу мембраны. Гидрофобный характер сердцевины бислоя определяет возможность или невозможность непосредственного проникновения через мембрану различных с физико-химической точки зрения веществ. Неполлярные вещества (холестерин) свободно проникают через биологические мембраны. По этой причине эндоцитоз и экзоцитоз полярных соединений происходят при помощи мембранных пузырьков. По этой же причине рецепторы неполярных молекул расположены внутри клетки. Полярные вещества (ионы, белки) не могут проникать через биологические мембраны. Именно поэтому рецепторы полярных молекул встроены в плазматическую мембрану, а передачу сигнала к другим клеточным компартаментам осуществляют вторые посредники. По

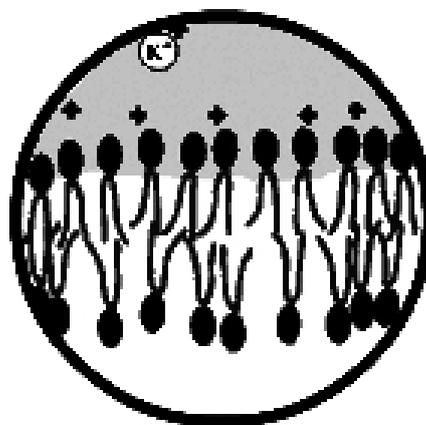


Рис. 1.15. Фрагмент биологического эффекта: реакции мембраны в клетке

Остановимся более подробно на **применении Интернет-технологий в химическом образовании**. Как указывалось выше, в отличие от ряда дисциплин физико-математического цикла компьютерное обучение общей, неорганической, органической, биохимии, а также другим химическим дисциплинам имеет свои специфические особенности. Они связаны с тем, что химия – это наука о веществах, их свойствах и превращениях. Существенный эффект в естественно-научных дисциплинах следует ожидать от использования компьютерных моделей с визуализацией получаемых результатов. Это позволяет совмещать интерактивность применяемых учебных средств с поливариантностью их использования и множественностью получаемых результатов при высокой наглядности последних.

Поэтому особо следует коснуться применения компьютерных моделей в открытом образовании химической и биологической направленности. Они позволяют получать разнообразную информацию

при варьировании запросов, не столь детерминированы в отличие от простого набора графических фрагментов. В качестве примера можно рассмотреть уже упомянутое применение квантово-химических моделей в химическом образовании. Моделирование может осуществляться в режиме удаленного доступа.

В Ярославском государственном университете в рамках проекта РФФИ осуществлено **развитие и применение системы** вычислительных серверов обеспечения фундаментальных исследований с удаленным доступом в Ярославском регионе.

Подобный подход сосредоточения мощных аппаратных, программных и кадровых ресурсов при обеспечении эффективного теледоступа к ним в научных и образовательных целях весьма эффективен. Рациональное использование аппаратных и программных ресурсов кластера при их сосредоточении в Интернет-центре ЯрГУ позволило увеличить количество пользователей системы до 100 человек. Это около 20 учебно-научных групп, занимающихся различными научными и образовательными направлениями, требующими интенсивных расчетных работ. Направления исследований включают в себя квантовую, органическую и физическую химию, теоретическую физику, математическое моделирование и оптимизацию информационно-вычислительных систем, исследование параллельных процессов, верификацию коммуникационных протоколов. Помимо научных исследований, ресурсы системы в режиме удаленного доступа могут быть полезны и для образовательных целей. Результаты моделирования молекулярных систем использовали студенты-биологи в своих курсовых и дипломных работах (будет рассмотрено позднее). Применялись они также в курсе «Теоретические основы органической химии».

Весьма существенной является возможность интерактивной работы с выбранными моделями, что создает основу виртуального практикума. Следует отметить применение основных визуализированных объектов и явлений в контрольно-тестовом блоке, что позволяет осуществлять контроль и самоконтроль знаний.

В режиме удаленного доступа для целей открытого образования может быть осуществлено и обращение к реальным приборам центров коллективного пользования. Подобный опыт имеется на сегодняшний день для нескольких вузов Москвы, которые в учебных це-

лях могут обращаться в центр коллективного пользования для работы на уникальном оборудовании.

Представление эффектов в химии и биологии для целей открытого образования подразумевает необходимость выявления связи между отдельными явлениями. Это подразумевает их реализацию в виде отдельных блоков с развитой внутренней и внешней связью явлений и понятий, реализуемой в форме системы гипертекстовых ссылок. Так, представление вопросов химического равновесия предполагает рассмотрение как общих закономерностей (представляемых в форме текстовых пояснений, визуализированных результатов моделирования, графических иллюстраций), так и частных проявлений в различных химических процессах (кислотно-основное равновесие, электролитическая диссоциация и др.).

Немаловажным фактором в процессе обучения является организация учебных материалов курса. В настоящее время среди русскоязычных ресурсов Интернет представлено большое количество высококачественных материалов по химии и биологии, включая справочные материалы. Поэтому при формировании интерфейса конкретного курса необходимо включать в его структуру ссылки на уже имеющиеся материалы, удовлетворяющие требованиям открытого образования в области химии и биологии. Однако представляется разумным, чтобы эти ссылки носили дублирующий и дополнительный характер. Это связано с невозможностью администрирования сторонних информационных ресурсов и соответственно со сложностями в организации стабильного учебного процесса.

Таким образом, в представлении курсов химической и биологической направленности в открытом образовании следует ожидать применения компьютерных моделей с широкой визуализацией результатов моделирования. Это может быть основой, как теоретического блока, так и виртуального практикума и контролирующей системы.

Следует отметить и еще одну форму повышения качества образования – **создание учебных курсов по различным вопросам высококвалифицированными специалистами территориально удаленных академических институтов** и сопровождение их авторами с использованием современных телекоммуникационных технологий. Как указывалось выше, такой курс является не автономной обучающей системой с элементами контроля, как электронный учебник. Он

служит формой взаимодействия, поскольку постоянно обновляется и содержит научные материалы (информацию и иллюстративный материал) территориально удаленного от вузов института РАН.

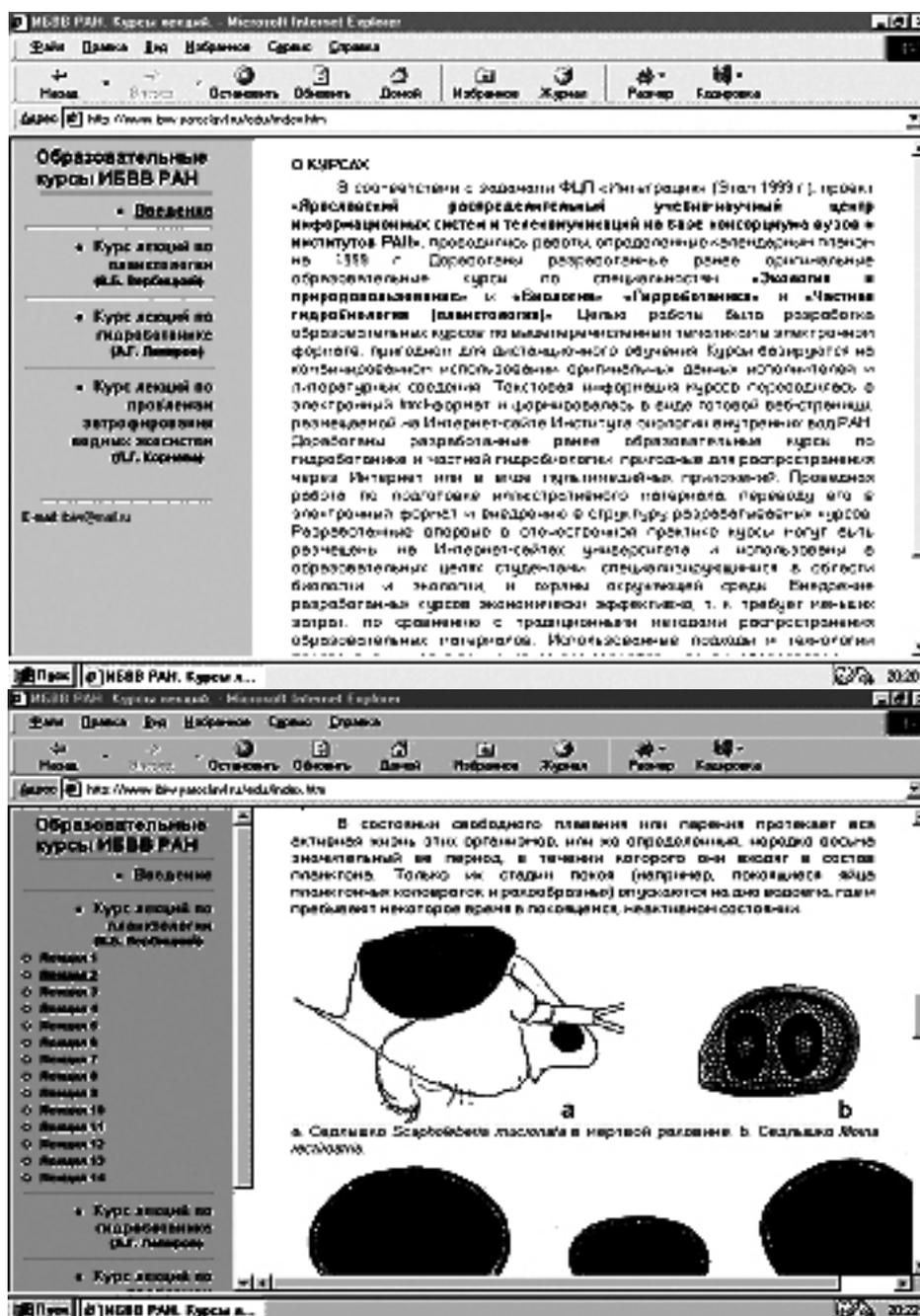


Рис. 1.16. Фрагменты учебных материалов, разработанных сотрудниками ИБВВ РАН для дистанционной поддержки образовательных курсов студентов-биологов ЯрГУ

Данный подход был использован при выполнении проекта «**Ярославский распределенный учебно-научный центр информационных систем и телекоммуникаций на базе консорциума вузов и институтов РАН**» по ФЦП «Интеграция». Сотрудниками Института биологии внутренних вод РАН (ИБВВ РАН) был создан электронный курс лекций по гидробиологии и при их дистанционном сопровождении использовался для обучения студентов-биологов в Ярославском государственном университете им. П.Г.Демидова. Эти учебные материалы выставлены на сайте ИБВВ РАН (www.ibiw.yaroslavl.ru/edu/index.htm).



Рис. 1.17. Схема расположения участников проекта и существующие телекоммуникационные каналы

В заключение следует отметить разработки, выполняемые в рамках программы «Создание системы открытого образования» по проекту «Разработка, апробация и опытная эксплуатация сетевых учебно-методических комплексов электронных средств поддержки обучения по основным инвариантным дисциплинам для естественнонаучных специальностей: специальности, относящиеся к направлениям подготовки 010000, 070000, 510000». По разделу «Химия» созданы 6 сетевых учебно-методических комплексов по следующим темам: «Квантовая механика и квантовая химия», «Техногенные системы и экологический риск», «Физические методы исследования», «Органическая химия», «Избранные главы органической химии», «Химическая кинетика и катализ», «Радикальные акции в химии, технологии и живом организме», «Химия окружающей среды», «Химия окружающей среды и химический мониторинг».

В состав учебно-методического комплекса электронных средств поддержки образования по дисциплине включены:

1. Программа курса по дисциплине.

- 1) предисловие, раскрывающее цели курса, соответствие государственному образовательному стандарту, трудоемкость курса;
- 2) перечень всех разделов и тем;
- 3) аннотация учебных вопросов каждой темы;
- 4) списки основной и дополнительной литературы;
- 5) примерная тематика рефератов;
- 6) список примерных экзаменационных вопросов.

2. Курс лекций.

Краткое изложение всех разделов и тем программы с указанием литературы для более подробного изучения.

3. Хрестоматия (в случае необходимости).

Выдержки из классических произведений, исторических источников, документов, сгруппированные по разделам программы.

4. Альбом схем и иллюстраций.

1) распечатка важнейших кадров видеоряда, используемых в электронном учебнике с заставками разделов, тем, логико-структурными схемами, таблицами, картами, портретами и пр.;

2) тексты вопросов учебных заданий, нацеленных на закрепление изучаемого материала и его лучшее понимание.

5. Гид по курсу.

1) полное описание комплекта учебно-методических материалов и средств курса;

2) инструкция обучаемого по использованию комплекта;

3) методические рекомендации для преподавателя по использованию комплекта в различных формах учебного процесса.

6. Электронный учебник.

1) Блок управления и предварительной информации;

2) анимационная заставка учебника;

3) вступительное видеообращение автора (авторов) курса к обучаемому;

4) панель выбора раздела, темы и вопроса курса для изучения;

5) экраны подсказки (имеющийся учебно-методический материал и способы работы с ним);

6) информация об авторах курса и участниках разработки курса;

7) информация об организациях разработчиков;

7. Блоки обучения.

1) анимационные заставки разделов и тем курса;

2) средства навигации по материалам курса и вызова информационной поддержки;

3) видеоряд по всем темам программы, в котором учебный материал четко структурирован на отдельные подтемы, вопросы, снабжен наглядными, легко обозримыми и запоминающимися схемами, таблицами, рисунками, портретами, картами, анимационными сюжетами, лаконичными записями основных положений курса;

4) интерактивные учебные задания для самоконтроля, нацеленные на закрепление изучаемого материала и его лучшее понимание.

8. Блок информационной поддержки.

- 1) гипертекстовый глоссарий имен и терминов;
- 2) тексты печатных учебных материалов, представленные в гипертекстовом виде;
- 3) подсказка по использованию экранных кнопок интерфейса.

9. ИНТЕРНЕТ-версия.

- 1) электронные версии печатных материалов в форме гипертекста;
- 2) раскадровка видеоряда электронного учебника в уменьшенном формате (возможно, без анимаций);
- 3) интерактивные учебные задания для самоконтроля и тестирования;
- 4) блок гипертекстовой информационной поддержки;
- 5) дополнительная учебная информация.

Содержание курсов полностью соответствует требованиям Государственных образовательных стандартов по специальности 011000-Химия. Курсы размещены на сервере www.openedu.ru

1.8. Заключение

На основе изложенного по вопросам электронного обеспечения химического, экологического и биологического образования можно заключить следующее.

Возрастающие требования к качеству образования на рубеже XX – XXI веков ставят вопрос о новом уровне информационного и технологического обеспечения образовательного процесса. Совершенствование информационных технологий в последние годы позволяет говорить о переходе на новый этап в развитии системы образования. Особое место в решении этого вопроса следует уделить INTERNET-технологиям. Всемирная компьютерная сеть, сложившаяся в конце XX века, значительно демократизировала процесс доступа к информационным ресурсам и обмен знаниями. Однако по отношению к образовательному процессу сервис и информация, представленные в INTERNET, сформированы явно недостаточно. Особенно

это относится к российской части сети, где учебная информация чаще всего немногочисленна, разрозненна и не систематизирована. Кроме нескольких специализированных, образовательные тематические серверы носят, чаще всего, методический характер и не рассчитаны на поддержку конкретных учебных курсов, особенно для естественно-научного на уровне высшего образования. В подобной ситуации весьма актуальным является формирование образовательного информационного русскоязычного пространства.

Это подразумевает тесное взаимодействие образовательных и научных учреждений региона в создании совместных учебных курсов и специализированных информационных ресурсов, предназначенных для поддержки конкретных учебных программ на основе технологий INTERNET, что позволяет создать основу качественного дистанционного образования. Немаловажную роль в этом должны играть и электронные филиалы библиотек. Дистанционную информационную поддержку учебных курсов можно условно разделить на два раздела: система ссылок на необходимые существующие информационные ресурсы; специализированные базы учебных данных.

Использование технологий INTERNET в учебном процессе позволяет также осуществлять удаленное взаимодействие: преподаватель – учащийся. Это возможно путем проведения телеконференций, интерактивных телеконференций, видеоконференций.

Проведение указанных мероприятий позволяет сформировать региональное образовательное пространство в форме «виртуального университета». Подобная форма обеспечивает расширенный доступ к новейшим образовательным технологиям и образовательной информации, дает высококачественное образование от школы до дополнительного высшего, обучение и консультации у лучших преподавателей и специалистов региона и России, доступные учебные и методические материалы. На базе Internet-технологий должны быть представлены авторизованные и поддерживаемые авторами учебные и методические материалы различных образовательных организаций региона и обеспечено взаимодействие с подобными и аналогичными проектами других регионов. Следует отметить, что подобный подход позволит реализовать в рамках региона и всей России концепцию современного непрерывного образования.

Компьютерные технологии, применяемые в научных исследованиях

2.1. Общая схема компьютерного обеспечения основных этапов научного исследования

В данном разделе будет рассмотрено применение НИТ в научной и учебно-научной деятельности по направлениям химия, биология, экология. Прежде всего это относится к выполнению курсовых и дипломных работ студентами естественнонаучных факультетов классических и педагогических университетов. Компьютерные технологии применяются практически на всех этапах научного исследования (табл. 2.1). Последовательность этапов может меняться, одни могут выпадать, другие – осуществляться параллельно, к некоторым можно и нужно неоднократно возвращаться. Например, графический анализ данных рекомендуется применять до и походу статистического, а также при визуализации результатов других этапов научного исследования.

Таблица 2.1

Программное обеспечение основных этапов научного исследования

Этапы исследования	Способы работы с информацией	Формы представления результатов	Программное обеспечение	Дисциплины
1	2	3	4	5
Подготовительный этап	Поиск и предварительный анализ информации о современном состоянии проблемы	Вербальные и концептуальные модели объекта исследования, обзор методов и результатов исследования	Информационно-поисковые системы, банки данных и знаний, текстовые и графические редакторы	Информатика, НИТУП

1	2	3	4	5
Планирование исследования	Расчет необходимого объема и определение структуры материала, планирование экспериментов	Схема и график проведения исследования, план экспериментов, планируемый набор необходимых опытов	Электронные таблицы, текстовые и графические редакторы, статистические пакеты	Математические методы в биологии и экологии, Основы обработки научных данных
Получение исходных данных	Наблюдение, эксперимент, компьютерное моделирование	Учетные ведомости, лабораторные журналы. Массивы данных, полученных в результате оцифровки кривых и изображений, компьютерного моделирования.	Специальное ПО	Специальные дисциплины
Создание баз данных	Структуризация данных, организация проверки данных при вводе, ввод, импорт и защита данных	Базы данных, данные ГИС	Встроенные и автономные системы управления базами данных (СУБД)	Информатика, ГИС, Математические методы в биологии и экологии
Обработка данных	Работа с выбросами и пропущенными значениями, преобразование данных, расчет индексов, экспорт и визуализация данных	Данные, подготовленные для анализа	Электронные таблицы, статистические пакеты	Математические методы в биологии и экологии, Основы обработки научных данных
Анализ данных	Графический анализ	Графики, математические модели зависимостей, статистические данные	Пакеты научной графики, электронные таблицы, статистические пакеты	Математические методы в биологии и экологии, Основы обработки научных данных, ГИС
	Статистический анализ	Таблицы, графики, схемы	Статистические пакеты	
	Анализ геопространственных данных	Электронные карты, схемы расположения станций, таблицы пространственных данных	Геоинформационные системы	

1	2	3	4	5
Синтез данных	Интерпретация экспериментальных результатов на основе литературных данных	Физическая, химическая, биологическая концептуальная основа модели	Информационные ресурсы Интернет и локальных баз данных	Математические методы в биологии и экологии, ихтиология
	Моделирование структура-свойства	Графоаналитические модели	Пакеты моделирования свойств математические пакеты	Основы обработки научных данных ГИС
	Математическое моделирование	Аналитические модели; Имитационные модели	Алгоритмические языки программирования	
Прогнозирование и экспертиза	Прогнозирование и экспертное оценивание	Прогнозы и экспертные заключения	ГИС, имитационные модели, экспертные системы	ГИС, Математические методы в биологии и экологии
Оформление, представление и обсуждение результатов исследования	Оформление результатов исследования в виде курсовых и дипломных работ, научных отчетов и статей	Текст с иллюстративной графикой, таблицами, математическими и химическими формулами, схемами, картами	Редакторы (текстовые, графические, математических и химических форматов)	Информатика, Математические методы в биологии и экологии, НИТУП, ГИС
	Представление результатов исследования в форме доклада	Презентации	Мультимедийные пакеты	НИТУП
	Обсуждение результатов и обмен информацией	Internet, электронная почта, телеконференции	Телекоммуникационные пакеты	Информатика, НИТУП

Все многообразие программного обеспечения научных исследований можно условно разделить на интегрированные системы обработки и анализа данных (включая электронные таблицы), алгоритмические языки программирования, геоинформационные системы (ГИС), системы управления базами данных (СУБД), редакторы (символьные и графические), специальные и вспомогательные программные продукты (телекоммуникационные пакеты, информационно-поисковые системы, программы машинного перевода, тематические

электронные словари и др.). Наибольший интерес для исследователей в области биологии, экологии и химии представляют интегрированные системы (Statistica и др.), включающие разнообразные средства подготовки, обработки и анализа данных, формирования отчетов. Подобные универсальные пакеты могут применяться практически на всех этапах научного исследования.

Особо следует отметить разнообразные электронные информационные ресурсы, необходимые для успешного проведения научной работы. Они могут находиться на локальном компьютере, CD либо быть доступными как сетевые Интернет-ресурсы. Будучи дополнением к научной литературе в ее классическом, «бумажном» виде, они позволяют знакомиться с новейшей, отобранной по заданному алгоритму, информацией и применяются, прежде всего, при планировании исследования и интерпретации его результатов.

2.2. Этапы научного исследования

Рассмотрим подробнее отдельные этапы исследования и применение в них компьютерных технологий.

Подготовительный этап научного исследования

Прежде всего необходимо точно определиться с целью и задачами исследования. Для этого необходима максимально полная информация по изучаемой проблеме. Она может быть найдена в научной литературе в ее классическом, «бумажном» виде (монографии, сборники научных статей, научные журналы). Эффективным дополнением служат разнообразные электронные информационные ресурсы. Они могут находиться на локальном компьютере, CD, либо быть доступными как сетевые, Интернет-ресурсы. Эти ресурсы позволяют знакомиться с новейшей, отобранной по заданному алгоритму (с использованием специализированной поисковой системы), информацией. Примером может служить электронная библиотека РФФИ (*elibrary.ru*). Ниже электронные информационные ресурсы и связанный с ними сервис будут рассмотрены подробнее.

Планирование исследования

Расчет объема необходимого материала для выполнения работы нужно произвести заранее, чтобы планируемые выборки отвечали требованию репрезентативности. Это особенно важно при проведении исследований в полевых условиях (в водных и наземных экосистемах). При этом необходимо учитывать пространственно-временные особенности функционирования объекта исследования. Подобный расчет можно провести, например, в электронных таблицах MS Excel по соответствующим формулам.

Планирование эксперимента. Исследование называется экспериментом, если входные переменные изменяются в точно учитываемых условиях, позволяя управлять ходом опытов и воссоздавать их результаты каждый раз при повторении с точностью до случайных ошибок. Под планированием эксперимента понимается процедура выбора числа опытов и условий их проведения, необходимых для решения поставленной задачи с требуемой точностью.

Планирование эксперимента относится к статистическим процедурам и реализовано в модуле "Планирование эксперимента" (Experimental Design) многих статистических пакетов, например Statistica и Statgraphics.

Получение исходных данных

Данные – это информация, полученная путем наблюдения или эксперимента и представленная в форме, пригодной для постоянного хранения, передачи, обработки и анализа.

Освоение методов получения исходных данных, в том числе с помощью компьютерных технологий, осуществляется в учебном процессе на спецпрактикумах, а также в ходе прохождения студентами учебно-полевых и производственных практик. При этом используются специальные аппаратно-программные комплексы (химия, физиология, ГИС и др.).

Особо следует отметить как активно развивающийся в последнее время тип научного эксперимента – компьютерный эксперимент или

компьютерное моделирование. Он все шире применяется в химии, биологии, экологии.

Широко применяемый в химии вид компьютерного эксперимента – квантово-химические расчеты. Их результаты позволяют строго и наглядно представить связь «структура-свойства», причем к свойствам могут относиться и различные виды биологической активности. Это делает указанный подход весьма ценным как для различных областей химии, так и биохимии, молекулярной биологии, токсикологии и др.

Развитие ЭВМ привнесло в химию также такой мощный метод исследования, как квантово-химические расчеты свойств молекул. Расчеты, позволяющие предсказать геометрическое строение, энергию и другие свойства известных и неизвестных молекул, часто называют новым важнейшим методом химических исследований, и значимость его сравнивают со значимостью метода ядерного магнитного резонанса. Однако между расчетами молекул методами квантовой химии и экспериментальными исследованиями существует фундаментальное различие: расчеты можно одинаково легко выполнить как для несуществующих или неустойчивых соединений, так и для таких продуктов, с которыми работают в лабораториях. Расчет молекулы тетраэдрана осуществим так же легко, как и аналогичный расчет молекулы бутана, а исследование интермедиатов со временем жизни порядка наносекунд и меньше, не сложнее, чем изучение стабильных продуктов той же реакции.

На сегодняшний день существует широкий набор программ и программных комплексов, позволяющих осуществить расчеты разнообразных молекулярных и надмолекулярных объектов различными методами: Морас7, Морас2000, ChemOffice, HyperChem и др.

Большая часть расчетов, выполненных до настоящего времени, ориентирована в основном на получение дополнительной информации об известных стабильных молекулах. При этом получены данные о геометрии молекулы, дипольном моменте, теплоте образования, потенциалах ионизации, распределении зарядов, порядках связи, спиновой плотности и т.д.

Прежде всего, следует отметить данные по оптимизированной геометрии молекулы: длины связей, валентные и двугранные углы. Они представлены в виде набора чисел. Современные компьютерные

технологии позволяют перевести эти данные в наглядное изображение молекулы в пространстве и менять ее расположение (например, вращать в нескольких плоскостях).

Представляются также данные по энергии образования, потенциалам ионизации и др. характеристикам изучаемой молекулы.

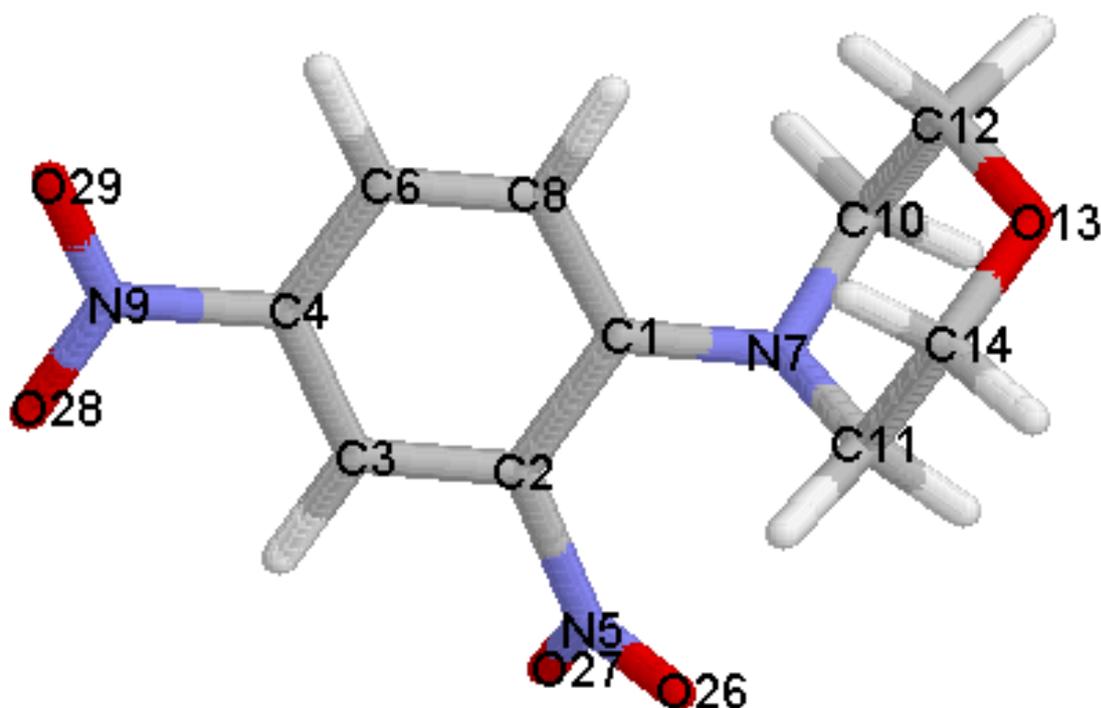


Рис. 2.1. Пример визуализации результатов расчетов

Важной характеристикой являются энергии молекулярных орбиталей и вклад каждого атома в их образование. Зачастую эти данные позволяют судить о предпочтительном направлении реакции при наличии нескольких реакционных центров. Так, максимальный вклад в образование граничной (нижней вакантной) молекулярной орбитали одного из атомов углерода представленного соединения является фактором, обеспечивающим протекание реакции именно по этому атому, что подтверждено экспериментальными данными.

В результатах расчетов приводятся также данные по зарядам на атомах в данной молекуле и по дипольному моменту.

Все эти разнообразные данные позволяют всесторонне охарактеризовать изучаемое соединение, оценить его свойства. Их интерпретация обладает определенной предсказательной силой.

Безусловно, существует определенное ограничение достоверности результатов расчетов, однако сильные и слабые стороны общепринятых методик хорошо известны, что позволяет реалистически оценить их точность при определении тех или иных характеристик молекулы.

Среди направлений компьютерного моделирования следует отметить также многочисленные на сегодняшний день программы, оценивающие биологическую активность органических молекул по формальному химическому строению (элементный состав, фрагменты структуры, функциональные группы). Примером может служить программа PASS – разработка ИБМХ РАН.

Биологическая активность, как результат взаимодействия химического вещества с определенным биологическим объектом, занимает особое место среди важнейших характеристик химических соединений. Наличие биологической активности может стать основой для практического использования веществ (БАВ) в качестве лекарств, ветеринарных препаратов, пищевых добавок, средств защиты растений, парфюмерных и косметических средств. С другой стороны, в некоторых случаях биологическая активность вещества является причиной нежелательных токсических эффектов, препятствующих производству и применению препаратов (потенциально опасные вещества, обладающие канцерогенностью, мутагенностью и т.п.).

Значительная часть известных БАВ была открыта случайным образом или путем скрининга (процедура отбора по принципу «да-нет», «нет» отбрасывается, оставшиеся структуры подвергаются дальнейшему исследованию), и этот способ выявления принципиально новых препаратов до сих пор является наиболее распространенным. В то же время, при поиске новых БАВ все шире применяют рациональные подходы, основанные на анализе взаимосвязей "структура-активность" (Structure-Activity Relationships = SAR; Quantitative Structure-Activity Relationships = QSAR) для известных биологически активных веществ и на моделировании взаимодействия макромолекул-мишеней с низкомолекулярными лигандами (Molecular Modelling). Большинство используемых в настоящее время для анализа зависимостей "структура-активность" методов SAR/QSAR позволяют предсказывать один или несколько видов активности в пределах одного химического класса соединений. Например, взаимосвязи "структура-активность" в ряду

производных аминопиридазина используют для поиска ингибиторов ацетилхолинэстеразы, а в ряду флавоноидов – лигандов бензодиазепинового сайта ГАМК А рецептора. Хорошо известно, что избирательность биологического действия – всегда относительна, и большинство известных биологически активных соединений обладает несколькими или даже многими видами биологической активности. Если бы было возможно оценить общий «биологический потенциал» молекулы (спектр биологической активности), то это позволило бы отобрать на ранних стадиях исследования вещества, обладающие требуемыми свойствами и не имеющие нежелательных видов биологической активности. Именно эта идея легла в основу разработки компьютерной программы прогноза спектра биологической активности химических соединений PASS – Prediction of Activity Spectra for Substances (Poroikov, Filimonov, 2001), которая позволяет предсказывать свыше 780 фармакологических эффектов, биохимических механизмов действия, канцерогенность, мутагенность, тератогенность и эмбриотоксичность по структурной формуле соединения на основе анализа обучающей выборки известных БАВ, принадлежащих к разным химическим классам.

Для оценки качества прогноза обычно используется процедура скользящего контроля с исключением по одному (leave one out cross-validation). При этом каждое соединение поочередно удаляется из обучающей выборки, и для него осуществляется прогноз на основе анализа взаимосвязей «структура-активность» для остальных веществ, оставшихся в обучающей выборке; результаты прогноза сравнивают с известными видами биологической активности для изучаемого вещества и рассчитывают среднюю точность прогноза для всех веществ и всех видов биологической активности. Для программы PASS средняя точность прогноза в условиях скользящего контроля составляет около 85%, что вполне достаточно для ее применения на практике. Это означает, что при экспериментальном тестировании биологической активности исследуемых веществ, в среднем примерно 15% прогнозов будут ошибочными,

- в среднем около 15% активных веществ спрогнозированы как неактивные и

- в среднем около 15% неактивных веществ спрогнозированы как активные.

Специальные эксперименты показали, что используемые в PASS дескрипторы и математический алгоритм обеспечивают получение устойчивых в статистическом смысле зависимостей «структура-активность» и позволяют получать разумные результаты прогноза. Это крайне важно, поскольку даже, если предположить, что нам удалось собрать из доступных источников и ввести в обучающую выборку PASS всю доступную информацию, все равно очевидно, что известные биологически активные вещества не изучались на все возможные виды биологической активности, и даже такая, «идеальная» выборка заведомо не является полной.

Оценка вероятности проявления различных видов биологической активности с помощью этой программы возможна в режиме удаленного доступа – она находится в свободном пользовании на сервере ИБМХ РАН (www.ibmh.msk.su/PASS/).

При проведении природоохранных исследований широкое применение нашли специализированные программы экологической направленности, в которых использование разнообразных компьютерных моделей позволяет представить картины загрязнения воздуха, почвы, водных систем в зависимости от набора факторов (загрязняющий агент, источник выброса, погодные условия, рельеф и др.). Подобные программы (например, комплекс Zone, Санкт-Петербург) являются эффективным симулятором техногенных катастроф с визуализацией результатов загрязнения. Они достаточно подробно рассмотрены в разделе 1.5.

Создание баз данных

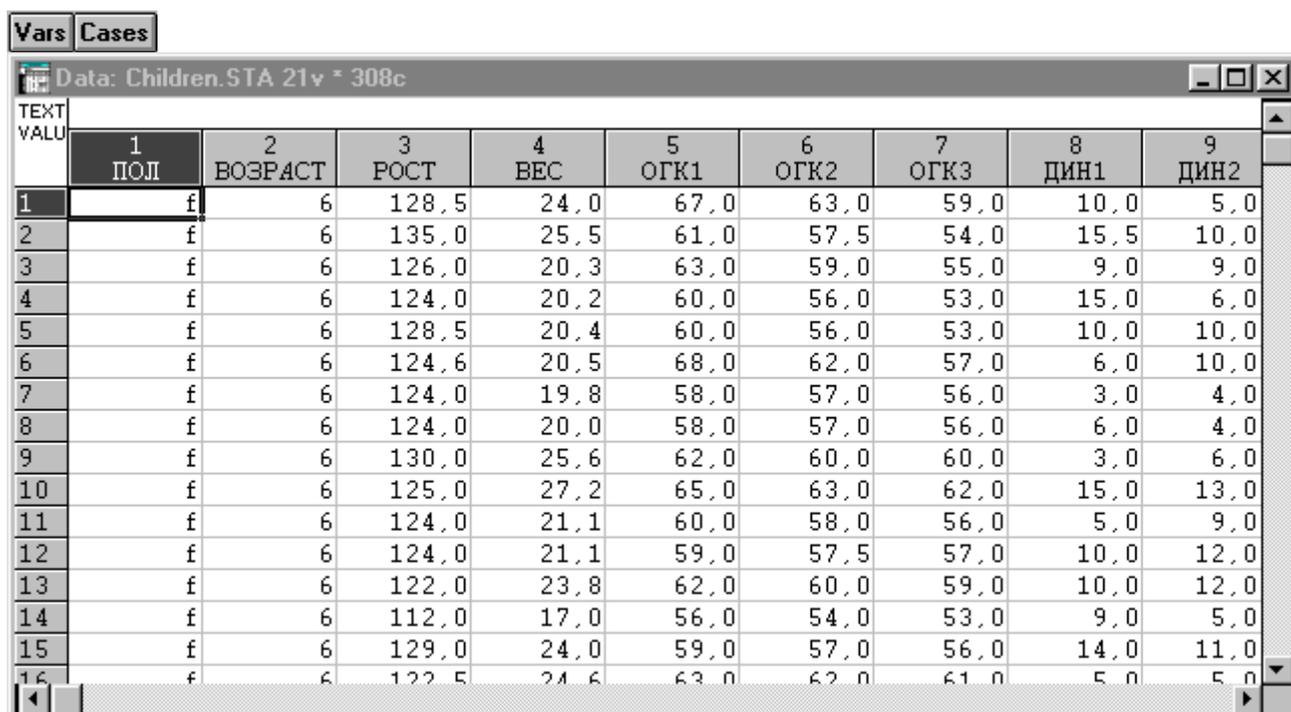
База данных – это совокупность связанных данных, организованных по определенным правилам, предусматривающим общие принципы их описания, хранения и использования. Работа с базами данных осуществляется с помощью системы управления базами данных (СУБД).

Любая база данных в своей основе имеет определенную структуру организации данных – схему информационного массива, в соответствии с которой упорядочены данные, с тем, чтобы их можно было интерпретировать и выполнять над ними определенные операции.

Простейшей базой данных является обычный лист электронной таблицы, например, MS Excel, состоящий из столбцов и строк и со-

держаций структурированный информационный массив. Подобные электронные таблицы используются в большинстве программных продуктов, связанных с обработкой и анализом данных.

Например, данные в системе Statistica организованы в виде электронной таблицы, содержащей переменные и наблюдения. Переменные можно рассматривать как эквивалент столбцов, а наблюдения – строк обычной электронной таблицы MS Excel. Каждое наблюдение состоит из набора значений переменных. Они могут содержать как численную, так и текстовую информацию. Данные в электронной таблице могут иметь различные форматы, например, даты, время, научный формат и др. Переменные и наблюдения можно добавлять или удалять из таблицы исходных данных, выбирая с помощью кнопок *Vars* (*переменные*) или *Cases* (*наблюдения*) на панели инструментов соответствующую команду из выпадающих меню: *Add* – добавить, *Delete* – удалить (рис. 2.2).



The screenshot shows the Statistica software interface with a data table. The window title is "Data: Children.STA 21v * 308c". The table has 10 columns and 16 rows. The columns are labeled: 1 ПОЛ, 2 ВОЗРАСТ, 3 РОСТ, 4 ВЕС, 5 ОГК1, 6 ОГК2, 7 ОГК3, 8 ДИН1, 9 ДИН2. The rows contain numerical data for each variable.

	1 ПОЛ	2 ВОЗРАСТ	3 РОСТ	4 ВЕС	5 ОГК1	6 ОГК2	7 ОГК3	8 ДИН1	9 ДИН2
1	f	6	128,5	24,0	67,0	63,0	59,0	10,0	5,0
2	f	6	135,0	25,5	61,0	57,5	54,0	15,5	10,0
3	f	6	126,0	20,3	63,0	59,0	55,0	9,0	9,0
4	f	6	124,0	20,2	60,0	56,0	53,0	15,0	6,0
5	f	6	128,5	20,4	60,0	56,0	53,0	10,0	10,0
6	f	6	124,6	20,5	68,0	62,0	57,0	6,0	10,0
7	f	6	124,0	19,8	58,0	57,0	56,0	3,0	4,0
8	f	6	124,0	20,0	58,0	57,0	56,0	6,0	4,0
9	f	6	130,0	25,6	62,0	60,0	60,0	3,0	6,0
10	f	6	125,0	27,2	65,0	63,0	62,0	15,0	13,0
11	f	6	124,0	21,1	60,0	58,0	56,0	5,0	9,0
12	f	6	124,0	21,1	59,0	57,5	57,0	10,0	12,0
13	f	6	122,0	23,8	62,0	60,0	59,0	10,0	12,0
14	f	6	112,0	17,0	56,0	54,0	53,0	9,0	5,0
15	f	6	129,0	24,0	59,0	57,0	56,0	14,0	11,0
16	f	6	122,5	24,6	63,0	62,0	61,0	5,0	5,0

*Рис.2.2. Электронная таблица системы Statistica.
Кнопка **Vars** обеспечивает управление столбцами таблицы
(переменными – **Variables**), **Cases** – строками (наблюдениями)*

Ввести данные в электронную таблицу можно одним из следующих способов:

- Непосредственно ввести их с клавиатуры. В системе Statistica имеются развитые инструментальные средства для автоматизации ручного ввода данных.

- Воспользоваться данными, подготовленными в другом приложении, используя операции копирования данных через *Буфер обмена* – *Clipboard Windows*.

Если в ходе выполнения исследования приходится иметь дело с геопространственными данными (означают информацию, которая идентифицирует географическое местоположение и свойства естественных или искусственно созданных объектов, а также их границ на земле; эта информация может быть получена с помощью, помимо иных путей, дистанционного зондирования, картографирования и различных видов), то для систематизации и хранения данных целесообразно использовать ГИС (раздел 1.5.). Надо отметить, что большинство современных ГИС дает возможность напрямую использовать данные электронных таблиц Excel, Lotus 1-2-3, форматы dBase и др.

Среди специальных баз данных следует отметить базы химических данных, прежде всего, ISIS/Base for Windows. ISIS/Base – это система управления базами данных (СУБД), обеспечивающая хранение, поиск и обработку данных по химической структуре и свойствам веществ, и возможность создания форм, удовлетворяющих конкретные потребности пользователя. Она может использоваться либо на отдельном персональном компьютере, либо как программа-клиент для более мощной СУБД ISIS/Host, расположенной на сервере, к которому имеется доступ по сети.

Возможности:

Создание персональных (лабораторных) баз данных и хранение информации в виде, оптимальном для пользователя. Поиск информации по запросам, форма которых определяется пользователем. Поиск по формам столь же легок, как и заполнение обычных бланков. Можно также комбинировать поиск по подструктуре с текстовыми и числовыми запросами.

Контролируемая выдача данных на дисплей с сортировкой. Сортировка возможна по любому уровню, включая нижние уровни

полей базы данных; возможна даже сортировка по нескольким (до 3-х) вложенным полям на любом уровне иерархии в удаленной базе данных. Порядок сортировки сохраняется, когда список записывается на диск.

Создание расчетных полей в формах. Поля, содержащие данные, являются производными от начальных (например, медианы по нескольким изменениям активности для вещества). ISIS/Base позволяет просматривать и сортировать данные по агрегируемым величинам, таким как, максимум, минимум, средняя, медиана, сумма и число отчетов.

Анализ результатов исследований. Экспорт данных в Microsoft Excel, где можно использовать ISIS for Excel для создания таблиц, представляющих зависимости структура-активность (SAR) или структура-свойство (SPR).

Обработка списков результатов: генерация временных списков автоматически; добавление, вычитание и пересечение списков; сохранение списков, которые включают результаты из произвольных источников данных; отбрасывание, перемещение и копирование данных внутри списка.

Подготовка отчетов. Можно просмотреть формы перед их печатью; сохранить ориентацию страниц в формах; и создавать, сохранять и печатать верхний и нижний колонтитулы.

Все возможные виды поиска “по химической структуре”. Поиск по молекулам, реакциям и различной информации, содержащейся в реляционных базах данных, включая поиск по структуре; обеспечивающий приблизительное и точное соответствие; по сходству, по R-группам, 3D структуре полимеров, подструктуре, формуле, численной и текстовой информации.

Связи с глобальными данными. Доступ к специализированным базам данных либо online, либо на WWW. Поиск и выдача на дисплей глобальной химической информации.

Перед непосредственным вводом данных рекомендуется организовать их проверку, а после ввода – различные формы защиты информации от потери или несанкционированного доступа. Информацию в подготовленную базу данных можно импортировать из других баз данных.

Обработка данных

Прежде чем приступить к анализу данных, необходимо произвести их проверку на наличие ошибок, а также осуществить предварительную подготовку.

Выявление ошибок сводится к проверке соответствия значений в базе данных приемлемому диапазону, установленному для данной переменной. Кроме того, следует обратить внимание на аномальные, резко уклоняющиеся значения (выбросы), которые можно обнаружить на диаграммах рассеяния и на пропущенные значения. При их наличии применяются специальные методы обработки данных.

Зачастую уже представление данных в графическом виде позволяет идентифицировать выпадающие точки и отбросить их, либо повторить эксперимент в условиях сомнительного результата.

Практически в каждом пакете обработки и анализа данных имеются возможности преобразования данных для анализа. Например, в системе *Statisica* можно вычислить новые данные на основе уже введенных при помощи формул, которые задаются в электронной таблице. При этом имеется возможность быстрого доступа к большому количеству математических функций, допускается использование и логических операторов.

На этом этапе исходные данные можно преобразовать в различные индексы: морфометрические, морфофизиологические, трофологические, видового разнообразия, качества окружающей среды и др. Например, на основе данных по видовому составу сообществ и численности отдельных популяций рассчитываются индексы видового разнообразия, которые в дальнейшем можно использовать в любых статистических процедурах. Расчет индексов удобно проводить в электронных таблицах, причем рекомендуется создать базу данных разнотипных индексов.

Анализ данных

Компьютерные системы для анализа данных относятся к наукоемким программным продуктам. Условно их можно разделить на системы визуализации данных (пакеты научной графики), статистические и математические пакеты. Основными программными продуктами, используемыми в учебном процессе и НИРС для анализа дан-

ных, являются электронные таблицы MS Excel, статистические пакеты Statistica, Stadia, Statgraphics и др.

Графический анализ данных

Категоризованные графики. Одним из наиболее мощных методов графического анализа является разделение данных на группы для сравнения структуры получившихся подмножеств. Эти методы широко применяются как в разведочном анализе данных, так и при проверке гипотез и известны под разными названиями (*классификация, группировка, категоризация, разбиение, расслоение* и пр.). Например, разбиение выборочных популяционных данных на подмножества, соответствующие половым, возрастным, размерным, пространственным и иным группам.

Категоризованные графики позволяют выявить закономерности, которые трудно поддаются количественному описанию и которые весьма сложно обнаружить с помощью вычислительных процедур. В этих случаях категоризованные графики предоставляют уникальные возможности многомерного аналитического исследования или "добычи" данных.

Диаграммы рассеяния. Двумерные диаграммы рассеяния используются для визуализации взаимосвязей между двумя переменными X и Y (например, весом и ростом). На этих диаграммах отдельные точки данных представлены маркерами на плоскости, где оси соответствуют переменным. Две координаты (X и Y), определяющие положение точки, соответствуют значениям переменных. Если между переменными существует сильная взаимосвязь, то точки на графике образуют упорядоченную структуру (например, прямую линию или характерную кривую). Если переменные не взаимосвязаны, то точки образуют "облако".

Графический анализ данных можно проводить как в специализированных пакетах научной графики (Grapher, Surfer), так и в интегрированных системах анализа данных. Например, система Statistica обладает широкими графическими возможностями. Она включает в себя большое количество разнообразных категорий и типов графиков (научные, деловые, трехмерные и двухмерные графики в различных системах координат, специализированные статистические графики – гистограммы, матричные, категоризованные графики и др.).

В систему Statistica включено большое количество инструментов настройки всех компонент графиков. Имеется возможность выбора различных типов линий, форматов разметки осей, цветов, легенд, названий и других атрибутов графика. Настроенные атрибуты могут быть сохранены в специальном файле и потом применяться к другим графикам. Доступ ко всем основным командам настройки реализован при помощи контекстных меню, которые появляются при нажатии на правую кнопку мыши, общего меню и из панели инструментов графика.

Графические средства системы *STATISTICA* доступны в любом статистическом модуле и на любом шаге статистического анализа. Они могут быть использованы в целях:

- визуализации численных и текстовых значений непосредственно из электронной таблицы с исходными данными или таблицы с результатами анализа;

- вывода результатов статистического анализа в виде последовательности (очереди) графиков. Для этого в диалоговых окнах всех статистических процедур имеется возможность построения различных, предназначенных именно для этого вида анализа типов графиков.

Визуализация данных является важным этапом статистического анализа. Очень важно подобрать вид графика, который наибольшим образом соответствует исследуемым данным. В систему Statistica включены удобные инструментальные средства для проведения интерактивного графического анализа данных. При помощи так называемой *Кисти*, можно выделить какие-либо точки на построенном графике (например, выбросы значений переменной) и провести дальнейший статистический анализ без значений, которые соответствуют этим точкам. Эти точки могут быть помечены специальным образом, им может быть присвоена метка. Численные значения, соответствующие выделенным точкам на графике, могут быть отмечены в специальной электронной таблице, которая связана с графиком и просмотрены в специальном *Редакторе данных графика*.

Графический документ в системе Statistica может быть сохранен как:

- графический документ в специальном графическом формате системы Statistica (расширение файла **.stg*), который может быть открыт позже и использован в процессе анализа;

- в графическом растровом формате (расширение файла *.bmp, *.psx).

Статистический анализ данных

Статистический анализ данных делится на отдельные, логически связанные между собой процедуры и методы:

Описательная статистика и разведочный анализ исходных данных. Включает вычисление основных выборочных характеристик (средних величин, показателей вариации, параметров распределения) и выявление структуры данных.

Точечное и интервальное оценивание генеральных параметров.

Выявление достоверности различий между выборочными совокупностями.

Дисперсионный анализ.

Статистическое исследование зависимостей:

- корреляционный анализ;
- регрессионный анализ;
- анализ временных рядов.

Многомерные методы:

- факторный анализ;
- кластерный анализ;
- дискриминантный анализ.

Программное обеспечение статистического анализа данных

Основными программными продуктами, используемыми в учебном процессе и НИРС, являются электронные таблицы MS Excel, статистические пакеты Statistica, Stadia, Statgraphics и др.

Анализ геопространственных данных

При выполнении многих экологических и биологических исследований студент имеет дело с геопространственными данными (см. выше). Использование ГИС дает возможность при анализе создать специализированную электронную карту и ответить на целый ряд вопросов:

- Где находится А?
- Как расположено А по отношению к В?
- Сколько А расположено в пределах расстояния от D до В?
- Каково значение функции Z в точке X?

- Как велико по размерам В?
- Каков результат пересечения А и В?
- Каков оптимальный маршрут от Х до У?
- Что находится в X_1, X_2, \dots, X_n ?
- Какие объекты следуют за теми, у которых наблюдается определенное сочетание определенных свойств?
- Как изменится пространственное распределение объектов, если изменить существующую классификацию?
- Что может случиться с А, если изменится В и его расположение относительно А?

При анализе данных в ГИС проводятся следующие операции:

Переструктуризация данных. Пространственные данные, введенные в среду ГИС, зачастую нуждаются в некоторых предварительных операциях, позволяющих адаптировать эти данные к дальнейшей обработке. Наиболее важными операциями являются операции преобразования данных из векторного в растровые представления и обратно.

Трансформации проекций и изменения систем координат. Операции пересчета координат пространственных объектов (операции ротации – поворота, сдвига, масштабирования осей) и более сложные трансформации, связанные, например, с "укладкой" объектов в систему опорных точек с точно известными координатами (например, привязка спутникового снимка), и трансформация картографических проекций как наиболее сложная подгруппа операций.

Картометрические (арифметические) операции включают в себя: расчет площадей, длин ломаных линий, периметров, площадей склонов, объемов, заключенных между поверхностями, координат центров полигонов. К ним принадлежат также операции определения принадлежности точки внутренней области полигона, описание геометрических и топологических отношений точечных, линейных и полигональных объектов двух разноименных слоев в целом при их наложении (оверлее). Геометрические утилиты используются для анализа пространственных данных и связей между ними. Очень часто создается буферная зона – район, граница которого отстоит на заданном или высчитанном расстоянии от границы исходного объекта, например, водоохранные зоны.

Оверлейные операции являются средством анализа множества разноименных и разнотипных по характеру локализации объектов. Суть их состоит в наложении двух разноименных слоев (или множества слоев, больше двух, при многократном повторении операции наложения) с созданием производных объектов, возникающих при их геометрическом наложении и с наследованием атрибутов.

Сетевой анализ позволяет проанализировать пространственные сети связанных линейных объектов (дороги, водопроводы, линии электропередач, гидрографическая сеть). Обычно сетевой анализ служит для задач определения ближайшего, наиболее выгодного пути, для определения зон влияния на объекты сети других объектов. Типичной задачей сетевого анализа является определение адреса.

Утилиты работы с полями баз данных включают в себя поиск имени поля и его значения, поиск по маске, создание, редактирование и удаление поля, калькуляцию, классификацию и перегруппировку. Калькуляция – создание нового поля и расчет его значений по значениям старых полей согласно введенной формуле. Например, расчет площади земельного участка по масштабу карты и координатам с сохранением полученного значения в новом поле с именем “площадь”. Классификация – создание нового значения в новом поле по классификационным правилам. Пример: классификация земельных участков по трем градациям – крупные, средние и мелкие по численным значениям поля “площадь” и сохранение результата в новом поле “размер”. Перегруппировка – создание нового значения по группам подобных значений. Например, сгруппировать земельные участки по типу: селитебная территория, пашня, сад, огород, свалка, лес и т.п., и подсчитать общую площадь земель каждого класса. В результате образуется новая таблица, которую можно записать в файл базы данных.

Операции с трехмерными объектами. В отличие от цифровых представлений точечных, линейных и площадных объектов трехмерные объекты – поверхности, рельефы, требуют особых форм представления, поскольку их пространственное положение должно описываться не только плановыми (географическими или геодезическими), но и высотными координатами. Моделироваться могут как изображение действительного рельефа или непрерывного поля (статически или динамически), так и воображаемые поверхности, построен-

ные по одному или нескольким показателям, например, поверхность цен на землю, поверхность экологического риска и т.д.

Анализ растровых изображений. В качестве таких изображений в ГИС обычно выступают снимки. Преимущество снимков – в их современности и достоверности. Поэтому достаточно часто встречающийся вид анализа – временной. Сравниваются и ищутся различия между снимками различной давности, таким образом, оценивается динамика произошедших изменений. Часто анализируются пространственные взаимосвязи нескольких явлений. К снимкам может также быть применен кластерный анализ, на основе которого выделяются области лесов, рек, полей и т.д. С растровыми образами производятся картометрические вычисления: длин, площадей, объемов. Существует специальная область анализа, которую иногда называют картографической алгеброй (map algebra).

Синтез данных

Интерпретация результатов на основе литературных данных. Для выполнения этой задачи необходима максимально полная информация по изучаемой проблеме, современным концепциям, фактическим данным. Она может быть найдена в научной литературе в ее классическом, «бумажном» виде либо в разнообразных электронных информационных ресурсах, которые находятся на локальном компьютере, CD либо доступны как сетевые, Интернет-ресурсы. Эти ресурсы позволяют знакомиться с новейшей, отобранной с использованием специализированной поисковой системы, информацией. Примером может служить указанная выше электронная библиотека РФФИ – elibrary.ru.

Необходимый элемент анализа данных – построение моделей, в том числе и математических. Простейший вариант – построение на основании данных, представленных в MS Excel. С помощью «Мастера диаграмм» строится график зависимости одного ряда значений от другого. Затем выполняется команда «Добавить линию тренда», и подбирается характер зависимости по максимальной величине коэффициента аппроксимации (он, так же как и уравнение зависимости, выносится на график при пометке соответствующего окошка в разделе Параметры). Полученная модель должна быть верифицирована (подтверждена) имеющимися литературными данными.

Графоаналитические модели позволяют представить объект как состоящий из набора структурных элементов. Этот подход часто используется в химии для построения модели зависимости структура-свойства. К нему относится, в частности, методология QSAR (англоязычная аббревиатура выражения «количественные отношения структура-свойства», см. выше).

Математические модели. В экологии и биологии широко применяются методы математического моделирования. Компьютерные технологии открыли новые возможности экспериментирования с объектами исследования, так трудно реализуемые в естественных условиях. Характер этого экспериментирования особый. Он позволяет производить опыты не с природными объектами, а с их подобиями, моделями, отражающими главные свойства, способы функционирования и взаимодействия как живых организмов между собой, так и со средой их обитания.

Моделирование позволяет масштабировать время функционирования модельных систем (сокращать или увеличивать) и выявлять "белые пятна" в наших представлениях об объектах исследования. Модель приобретает особую ценность, когда она позволяет прогнозировать их поведение.

В экологии большое распространение получило имитационное моделирование. В имитационных моделях элементы и процессы оригинала описываются абстрактными символами и операциями над ними. При этом логическая структура исследуемого объекта, последовательность протекания в нем процессов и состав информации сохраняются, а поведение системы в целом изучается на основании поведения ее частей и взаимодействия между этими частями.

Для реализации подобных моделей на компьютере используются алгоритмические языки программирования. Наиболее простым в освоении, но достаточно удобным и эффективным в использовании, является Бейсик (Basic). Он преподается во многих школах в курсе "Информатика", на биологических факультетах российских и зарубежных вузов. На этом языке написано большое количество программ в области биологии и экологии, в частности математических моделей биологических и экологических систем. Бейсик имеет много различных версий и модификаций: интерпретаторы (aBasic, GW Basic) и компиляторы (Turbo Basic, Qwick Basic, Power Basic). При необходимости можно

использовать и другие языки программирования, например, объектно-ориентированные версии языка Turbo Pascal.

Ниже мы рассмотрим основные характеристики некоторых, указанных в таблице программных продуктов и информационных ресурсов, их применение в химических, биологических, экологических исследованиях, что в значительной степени раскрывает содержание нерассмотренных этапов (возможности программных продуктов в значительной степени раскрывают суть этапов – «Прогнозирование и экспертиза», «Оформление», «Представление и обсуждение результатов исследования»).

2.3. Основные программные продукты, применяемые в химических, биологических, экологических исследованиях

2.3.1. Текстовые редакторы

Текстовые редакторы – это программы обработки текста, которые используются для создания новых документов (отчетов, курсовых и дипломных работ и т.д.) или изменения уже существующих. Современные текстовые редакторы иногда называются текстовыми процессорами, поскольку содержат очень большое количество функций обработки текста. Наиболее популярным программным продуктом в этом сегменте ПО является MS Word.

Microsoft Word позволяет вводить, редактировать, форматировать и оформлять текст и рационально размещать его на странице. С помощью этого редактора удобно генерировать таблицы, вставлять в документ различные объекты (в том числе и графические), а также автоматически исправлять орфографические и грамматические ошибки.

Весь процесс редактирования документа сводится к нескольким операциям: удаление, добавление, копирование и перемещение информации. Можно удалять, добавлять, перемещать и копировать отдельные символы, слова, строки, предложения, абзацы, фрагменты текста, или даже весь текст как в пределах одного документа, так и в их совокупности.

При работе со сложными документами, содержащими большое количество глав, разделов, а также подчиненных документов, можно

воспользоваться мощным средством создания структуры документа (иерархии документов, разделов и заголовков различных уровней).

В редактируемый документ удобно вставлять различные диаграммы с помощью "Мастера диаграмм" и математические формулы (вставка объекта Equation – редактора формул).

MS Word содержит встроенный графический редактор. С помощью этого редактора создаются рисунки в тексте документа с использованием функции рисования примитивов или элементарных геометрических объектов: линий, прямоугольников, кругов и т.д.

2.3.2. Электронные таблицы MS Excel

Электронные таблицы – один из основных инструментов компьютерной поддержки научных исследований при выполнении курсовых и дипломных работ. Они располагают разнообразными и достаточно эффективными средствами обработки, анализа и визуализации данных, а также ведения баз данных. Сюда относятся формулы, разнотипные встроенные функции, различные типы графиков в "Мастере диаграмм", пакет анализа данных.

Электронные таблицы позволяют организовать структуризацию и проверку данных, их предварительную подготовку путем фильтрации и сортировки по различным критериям, обработку с помощью формул и функций, проведение графического и статистического анализа данных. Результаты в виде таблиц и графиков могут быть экспортированы в текстовые редакторы или специальные пакеты для подготовки демонстрационных материалов (Power Point).

Обработка данных осуществляется с помощью формул и функций. Функции – это заранее определенные формулы, которые выполняют вычисления над заданными величинами, называемым аргументами. Список аргументов состоит из чисел, текста, логических величин, массивов и др. Кроме того, аргументы бывают как константами, так и формулами. MS Excel имеет в своем составе большой набор встроенных математических и статистических функций, которые могут быть задействованы с помощью "Мастера функций".

Кроме того, в MS Excel имеется специальный набор средств анализа данных, предназначенный для решения статистических задач (табл. 2.2, рис. 2.3). Обращение к этому инструментарию производит-

ся из меню "Сервис", пункт "Анализ данных". Если пакет анализа не установлен, следует использовать пункт "Надстройки".

Таблица 2.2

Основные инструменты пакета "Анализ данных"

Дисперсионный анализ	Пакет анализа включает в себя три варианта дисперсионного анализа: однофакторный, двухфакторный с повторениями и без повторений.
Корреляция	В результате анализа формируется корреляционная матрица, содержащая коэффициенты корреляции Пирсона.
Описательная статистика	Это средство анализа служит для создания статистического отчета, содержащего информацию о среднем значении, показателях вариации, стандартной ошибке и др. параметрах одной или нескольких выборок.
Двухвыборочный F-тест для дисперсий	Двухвыборочный F-тест применяется для сравнения дисперсий двух генеральных совокупностей.
Регрессия	Регрессионный анализ заключается в подборе уравнения и соответствующего графика для набора наблюдений с помощью метода наименьших квадратов. Регрессия используется для анализа воздействия на отдельную зависимую переменную значений одной или более независимых переменных.
Парный двухвыборочный t-тест для средних	Парный двухвыборочный t-тест Стьюдента используется для проверки гипотезы о различии средних для двух выборок данных. В нем не предполагается равенство дисперсий генеральных совокупностей, из которых выбраны данные. Парный тест используется, когда имеется естественная парность наблюдений в выборках, например, когда генеральная совокупность тестируется дважды.
Двухвыборочный t-тест	Двухвыборочный t-тест Стьюдента служит для проверки гипотезы о равенстве средних для двух выборок. Одна форма t-теста предполагает совпадение дисперсий генеральных совокупностей, другая – несовпадение.

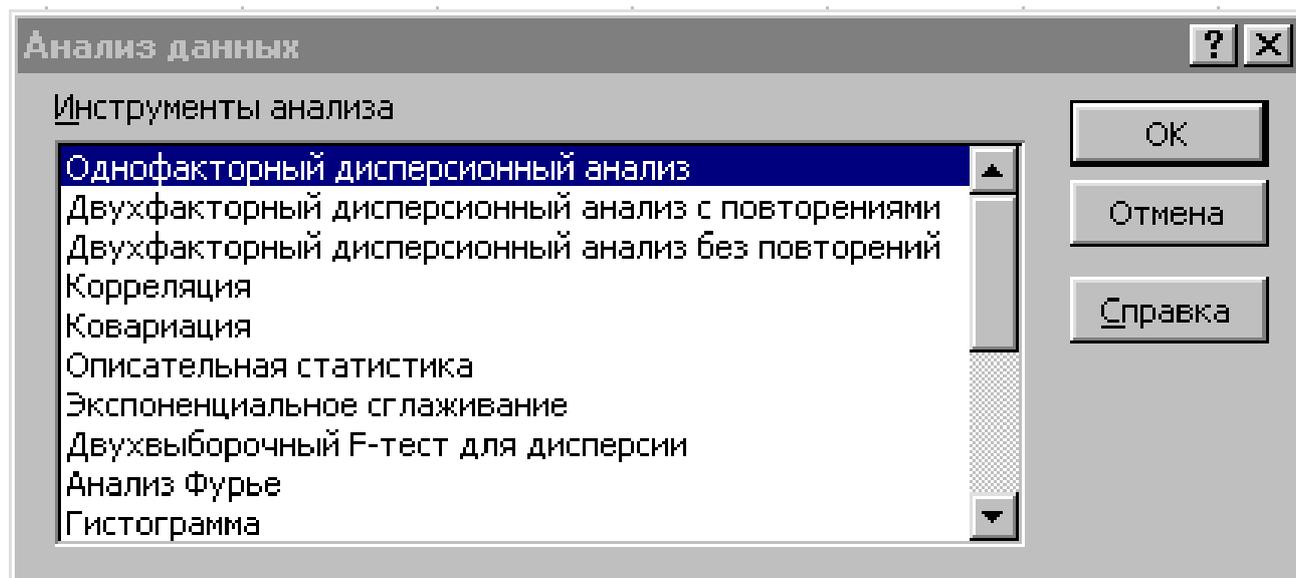


Рис. 2.3. Общий вид списка инструментов статистического анализа данных

В целом электронные таблицы можно рекомендовать студентам при выполнении большинства курсовых и дипломных работ химической, биологической и экологической тематики для хранения, обработки и оформления результатов анализа данных.

2.3.3. **Пакет прикладных программ Statistica**

Ниже приводится краткое описание наиболее популярного пакета – Statistica, являющегося фактически стандартом в данном сегменте ПО.

Общая структура системы

Statistica представляет собой интегрированную систему обработки и статистического анализа данных. Система состоит из следующих основных компонентов:

- многофункциональной системы для работы с данными, которая включает в себя электронные таблицы для ввода и задания исходных данных, а также специальные таблицы для вывода численных резуль-

татов анализа. Для сложной (специализированной) обработки данных в Statistica имеется модуль «Управления данными»;

- графической системы для визуализации данных и результатов статистического анализа;

- набора статистических модулей, в которых собраны группы логически связанных между собой статистических процедур. В любом конкретном модуле можно выполнить определенный способ статистической обработки, не обращаясь к процедурам из других модулей. Каждый модуль является полноценным Windows приложением. Поэтому пользователь имеет возможность одновременной работы как с одним, так и с несколькими модулями. Все основные операции при работе с данными и графические возможности доступны в любом статистическом модуле и на любом шаге анализа;

- специального инструментария для подготовки отчетов. При помощи текстового редактора, встроенного в систему, можно готовить полноценные отчеты. В пакете также имеется возможность автоматического создания отчетов.

Все структурные компоненты системы Statistica настолько тесно интегрированы между собой, что разделение на различные компоненты во многом условно и является полезным лишь для изучения системы с методической точки зрения.

Statistica работает с четырьмя различными типами документов, которые соответствуют основным структурным компонентам системы. Это:

- электронная таблица *Spreadsheet*, которая предназначена для ввода исходных данных и их преобразования;

- электронная таблица *Scrollsheet* для вывода численных и текстовых результатов анализа;

- график – документ в специальном графическом формате для визуализации и графического представления численной информации;

- отчет – документ в формате RTF (Расширенный текстовый формат) для вывода текстовой и графической информации.

В соответствии со стандартами среды Windows каждый тип документа выводится в своем собственном окне в рабочей области системы Statistica. Как только это окно становится активным, изменяется панель инструментов и меню. В них появляются команды и кнопки, доступные для активного документа.

Основные шаги обработки данных в системе Statistica

Статистическая обработка данных в системе Statistica обычно состоит из следующих основных шагов:

- ввод исходных данных в электронную таблицу системы Statistica;
- предварительные преобразования данных перед непосредственным применением конкретного статистического метода;
- визуализация данных при помощи того или иного типа графиков;
- статистический анализ при помощи выбранного метода;
- вывод численных, текстовых и графических результатов на экран, в отдельные файлы или в файл с отчетом.

Статистический анализ в пакете прикладных программ Statistica

Статистические процедуры системы STATISTICA сгруппированы в нескольких специализированных статистических модулях (рис. 2.4). В каждом модуле можно выполнить определенный способ анализа данных, не обращаясь к процедурам из других модулей.

Модуль "Основные статистики". Если вы хотите провести предварительную обработку данных, осуществить разведочный анализ, определить зависимости между ними, разбить их различными способами на группы, просмотреть эти группы визуально и определить взаимосвязи между данными, запустите модуль Basic Statistics – "Основные статистики" (рис. 2.5). Обычно с этого модуля начинается работа в системе.

Этот статистический модуль включает в себя приведенные ниже группы статистических процедур.

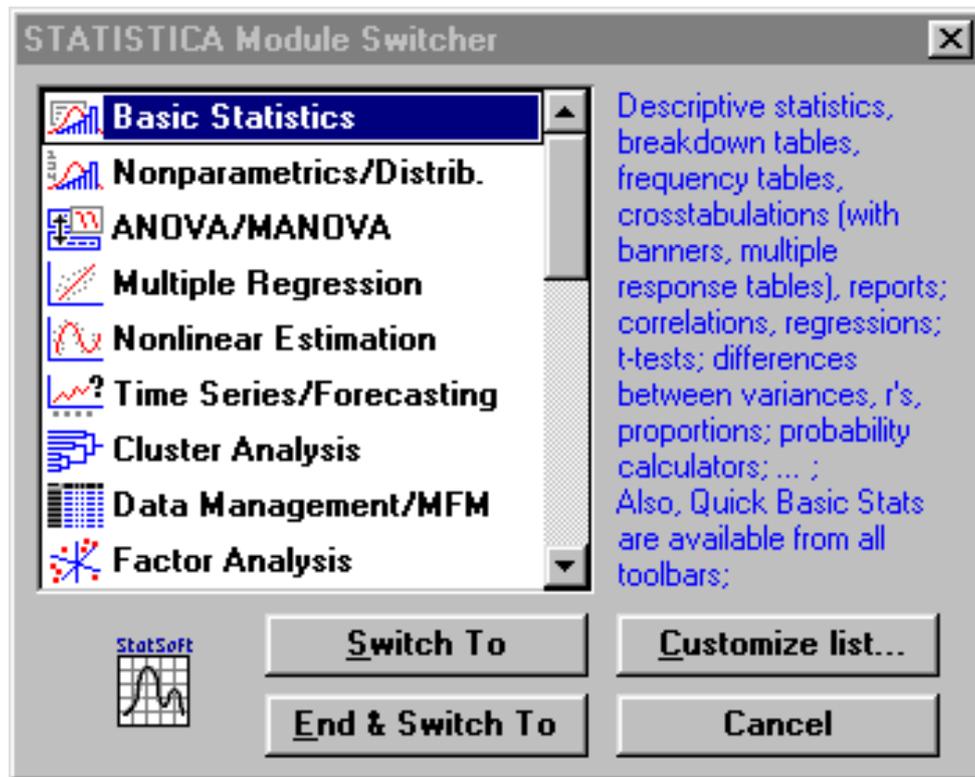


Рис. 2.4. Переключатель модулей системы Statistica.

Switch To – переключиться в выбранный модуль,
End & Switch To – закрыть активный модуль и переключиться в выбранный, *Customize list...* – изменить список модулей

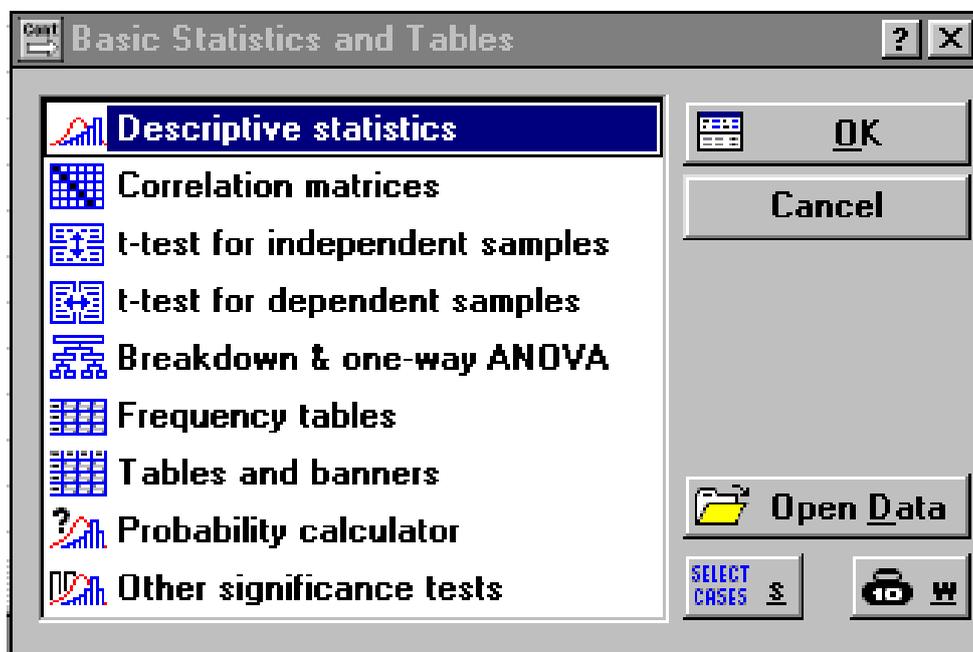


Рис. 2.5. Стартовая панель модуля *Basic Statistic and Tables*
(Основные статистики и таблицы)

Описательные статистики, группировки, разведочный анализ. Система STATISTICA предлагает широкий выбор методов разведочного статистического анализа. Здесь можно вычислить практически все описательные статистики общего характера, включая медиану, моду, квартили, определенные пользователем процентиля, среднее значение и стандартное отклонение, доверительный интервал для среднего, асимметрию и эксцесс с их стандартными ошибками и др. Практически все описательные статистики могут быть вычислены для данных, разделенных на группы с помощью одной или нескольких группирующих переменных. Так, всего несколько щелчков мыши позволяют разбить данные на группы, например, по ПОЛУ и ВОЗРАСТУ, и посмотреть категоризованные (категорированные) гистограммы на графике, а также графики значений, матричные и многие другие типы графиков.

Корреляции. Этот раздел включает средства, позволяющие исследовать зависимости между переменными с использованием коэффициента корреляции Пирсона. Специальные графические возможности позволяют выбрать отдельные точки на диаграмме рассеяния и оценить их вклад в линию регрессии. Вычисленные корреляционные матрицы выводятся в виде электронных таблиц *Scrollsheet*.

t – критерии и другие критерии для групповых различий

Модуль "Дисперсионный анализ". Если вам известны факторы, которые воздействуют на измеряемые вами данные, и вы хотите оценить степень этого воздействия, понять, существенно оно или нет, выберите модуль ANOVA. Модуль представляет собой набор процедур общего одномерного и многомерного дисперсионного анализа.

Модуль "Множественная регрессия". Если вы хотите построить зависимости между многомерными переменными, подобрать простую линейную модель и оценить ее адекватность, воспользуйтесь модулем – Multiple Regression.

Модуль "Непараметрическая статистика и подгонка распределений". Если вы хотите проверить различные гипотезы о характере распределения ваших данных, работайте в модуле Nonparametrics/Distribution – "Непараметрическая статистика/Распределения". Модуль содержит обширный набор непараметрических критериев со-

гласия, в частности, критерий Колмогорова-Смирнова, а также ранговые критерии Манна-Уитни, Вилкоксона и многие другие (рис. 2.6.).

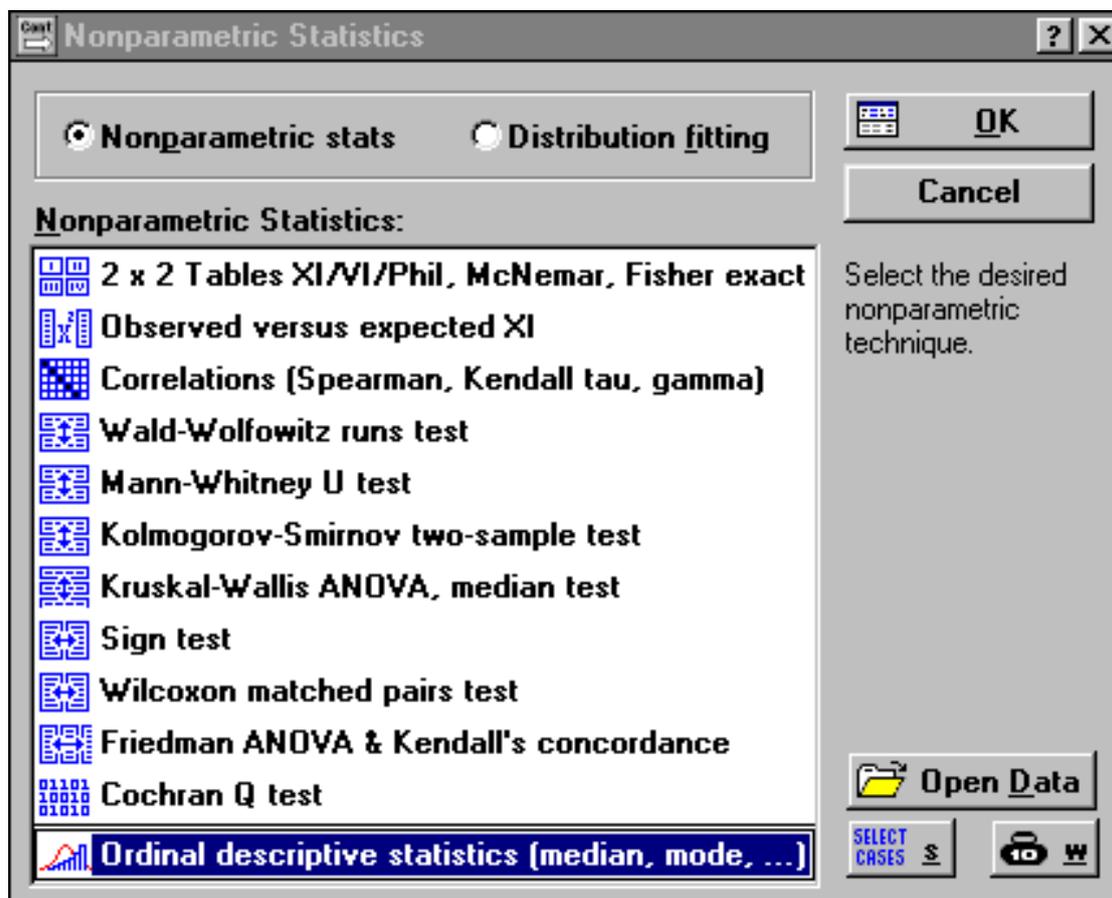


Рис. 2.6. Стартовая панель модуля *Nonparametric Statistics* (Непараметрическая статистика).

Статистические процедуры модуля позволяют пользователю легко сравнить распределение наблюдаемых величин с большим количеством различных теоретических распределений. Вы можете подогнать к данным нормальное, равномерное, линейное, экспоненциальное, биномиальное, Пуассоновское, геометрическое распределения, распределение Бернулли. Точность подгонки оценивается с помощью критерия хи-квадрат или одновыборочного критерия Колмогорова-Смирнова (параметры подгонки могут контролироваться). Дополнительно подгонка гипотетического распределения к эмпирическому может быть оценена в пользовательских гистограммах (стандартных или кумулятивных) с наложением на них выбранных функций. Линейные и столбчатые графики ожидаемых и наблюдаемых частот могут быть получены непосредственно из таблицы с выходными дан-

ными. Определенные пользователем функции от одной и двух переменных также легко могут быть построены и наложены на графики.

Модуль "Факторный анализ" содержит широкий набор статистик и методов факторного анализа с расширенной диагностикой и большим многообразием исследовательских и разведочных графиков. Здесь можно выполнять анализ главных компонент и главных факторов для наборов данных, содержащих до 300 переменных. Выходные результаты включают: собственные значения (обычные, кумулятивные и относительные), нагрузки факторов и коэффициенты факторных баллов. Пространство факторов можно визуально просматривать "срез за срезом" на двух- или трехмерных диаграммах рассеяния с отмеченными точками данных; среди других графических средств – графики "каменистой осыпи", различные типы диаграмм рассеяния, гистограммы, линейные графики и др. После того, как факторное решение определено, пользователь может вычислить (воспроизвести) корреляционную матрицу и оценить согласованность факторной модели путем анализа остаточной корреляционной матрицы (или остаточной дисперсионной/ковариационной матрицы). На входе можно использовать как исходные данные, так и матрицы корреляций.

Вывод численных и текстовых результатов анализа в системе Statistica

Численные результаты статистического анализа в системе Statistica выводятся в виде специальных электронных таблиц, которые называются таблицами вывода результатов – *Scrollsheets*. Таблицы *Scrollsheet* могут содержать любую информацию (как численную, так и текстовую), от короткой строчки до мегабайтов результатов. Обычно даже в результате простейшего статистического анализа на выходе получается большое количество численной и графической информации. В системе Statistica эта информация выводится в виде последовательности (очереди), которая состоит из набора таблиц *Scrollsheet* и графиков.

Statistica содержит большое количество инструментов для удобного просмотра результатов статистического анализа, и их визуализации. Они включают в себя стандартные операции по редактированию таблицы (включая операции над блоками значений, *Drag-and-Drop* – "Перетащить и опустить", автозаполнение блоков и др.), опе-

рации удобного просмотра (подвижные границы столбцов, разделение прокрутки в таблице и др.), доступ к основным статистикам и графическим возможностям системы Statistica. При выводе целого ряда результатов (например, корреляционной матрицы) Statistica отмечает значимые коэффициенты корреляции красным цветом. Пользователь так же имеет возможность выделить при помощи цвета необходимые значения в таблице *Scrollsheet*.

Если пользователю необходимо провести детальный статистический анализ промежуточных результатов, то можно сохранить таблицу *Scrollsheet* в формате файла данных Statistica и далее работать с ним, как с обычными данными.

Кроме вывода результатов анализа в виде отдельных окон с графиками и таблицами *Scrollsheet*, в системе имеется возможность создания отчета, в окно которого может быть выведена вся эта информация. Отчет – это документ (в формате *RTF*), который может содержать любую текстовую или графическую информацию. В Statistica имеется возможность автоматического создания отчета, так называемого автоотчета. При этом любая таблица *Scrollsheet* или график могут автоматически быть направлены в отчет.

2.3.4. Программные комплексы квантово-химического моделирования

Квантово-химическое моделирование – широко применяемый вид компьютерного эксперимента. Их результаты позволяют строго и наглядно представить связь «структура-свойства», причем, к свойствам могут относиться и различные виды биологической активности. Это делает указанный подход весьма ценным как для различных областей химии, так и биохимии, молекулярной биологии, токсикологии и др.

На сегодняшний день существует широкий набор программ и программных комплексов, позволяющих осуществить расчеты разнообразных молекулярных и надмолекулярных объектов различными методами: Морас7, Морас2000, ChemOffice, HyperChem и др..

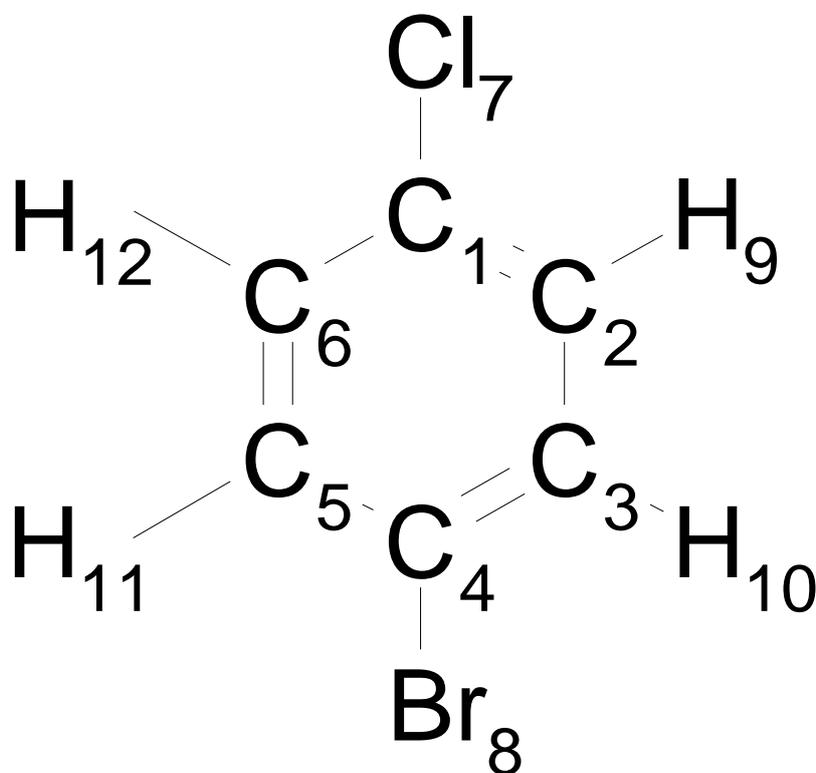
Из существующих подходов в рамках настоящего пособия будут рассмотрены только полуэмпирические методы, дающие удовлетворительные результаты при умеренных затратах компьютерного времени (квантово-химические расчеты требуют достаточно длительного

времени – от секунд до десятков часов – в зависимости от сложности объекта и мощности компьютера).

В Ярославском государственном университете в рамках проекта РФФИ осуществлено развитие и применение системы вычислительных серверов обеспечения фундаментальных исследований с удаленным доступом в Ярославском регионе. Подобный подход сосредоточения мощных аппаратных, программных и кадровых ресурсов при обеспечении эффективного теледоступа к ним в научных и образовательных целях весьма эффективен. В частности, эта система предназначена для проведения квантово-химических расчетов. Установлен целый набор программных продуктов, в том числе, программный комплекс Морас7.0, который позволяет проводить моделирование самыми разными полуэмпирическими методами и обеспечивает современный уровень компьютерных исследований. Характеристики программных продуктов и условия регистрации пользователей вычислительного сервера представлены на сайте www.yars.free.net.

Для проведения расчета необходимо подготовить исходные данные, которые представляются в виде Z-матрицы – описания взаимного пространственного расположения атомов в молекулярном объекте.

Для соединения, имеющего следующую структурную формулу



Z-матрица имеет следующий вид:

```

AM1 CHARGE=0 VECTORS T=999M PREC PULAY
dinitroftorobenzene
C      0.0000      0      0.0000      0      0.0000      0      0      0      0
C      1.4000      1      0.0000      0      0.0000      0      1      0      0
C      1.4000      1  120.0000      1      0.0000      0      2      1      0
C      1.4000      1  120.0000      1      0.0000      1      3      2      1
C      1.4000      1  120.0000      1      0.0000      1      4      3      2
C      1.4000      1  120.0000      1      0.0000      1      5      4      3
Cl     1.6000      1  120.0000      1  180.0000      1      1      2      3
Br     1.7000      1  120.0000      1  180.0000      1      4      5      6
H      1.0000      1  120.0000      1  180.0000      1      2      3      4
H      1.0000      1  120.0000      1  180.0000      1      3      4      5
H      1.0000      1  120.0000      1  1800.0000      1      5      4      3
H      1.0000      1  120.0000      1  180.0000      1      6      5      4
    
```

Первая строка – командная. Она содержит ряд ключевых слов, определяющих условия расчета;

AM1 – метод расчета;

CHARGE = 0 – заряд системы равен 0;

VECTORS – в результатах расчета будет представлена структура молекулярных орбиталей;

T = 999MINUTES – время расчета ограничивается 999 минутами;

PRECISE, PULAY – критерии проведения расчета.

Вторая строка – название или обозначение моделируемого соединения (выбирается произвольно);

1-й столбец Z-матрицы – обозначения атомов элементов, содержащихся в молекулярном объекте. Расположены по возрастанию номера. Нумерация, представленная на структуре, произвольная. Единственное условие – три последовательных атома не должны лежать на одной прямой (это связано с тем, что три последовательных атома образуют плоскость, относительно которой измеряется пространственный угол).

2-й столбец – межатомные расстояния (A^0) между соседними атомами. Берутся табличные значения при составлении Z-матрицы вручную либо выбираются из базы данных, если она составляется с помощью программы. Номер атома, расстояние до которого представлено, показан в столбце 8.

3-й столбец – символы, указывающие на необходимость или отсутствие необходимости оптимизации расстояний между атомами при проведении расчета (1 – необходимость оптимизации, 0 – нет необходимости).

4-й столбец – углы между двумя прямыми, соединяющими три атома с указанными номерами (атом в 1-ом столбце и атомы под номерами, указанными в столбцах 8 и 9). Например, 3-я строка Z-матрицы: указан угол, между линиями, соединяющими 3-й атом со 2-м и 2-й – с 1-м. В приведенном примере, это – угол между связями.

5-й столбец – символы, указывающие на необходимость или отсутствие необходимости оптимизации углов между двумя прямыми, соединяющими три атома с указанными номерами при проведении расчета (1 – необходимость оптимизации, 0 – нет необходимости).

6-й столбец – угол между плоскостью, организуемой тремя атомами, указанными в столбцах 8, 9 и 10 и прямой, соединяющий атом столбца 8 и столбца 1 (пространственный угол).

7-й столбец – символы, указывающие на необходимость или отсутствие необходимости оптимизации углов между плоскостью, организуемой тремя атомами, указанными в столбцах 8, 9 и 10 и прямой, соединяющий атом столбца 8 и столбца 1 (1 – необходимость оптимизации, 0 – нет необходимости).

Z-матрица может создаваться вручную либо с использованием программ PCModel, разделов комплекса ChemOffice2000 и др. В последнем случае с применением графического интерфейса рисуется соответствующая структура, предварительно оптимизируется (например, с использованием упрощенного варианта метода молекулярной механики) и сохраняется в виде соответствующей Z-матрицы с введением необходимой командной строки.

Сформированная Z-матрица в виде файла пересылается на вычислительный сервер (в именную папку пользователя) и в режиме удаленного доступа запускается процесс вычисления. По окончании расчета с его результатами можно ознакомиться либо в режиме удаленного доступа, либо переслав их себе на компьютер.

Расчет можно считать проведенным успешно при наличии в нем надписи:

```
HERBERTS TEST WAS SATISFIED IN BFGS  
SCF FIELD WAS ACHIEVE
```

Менее удачными, но в некоторых случаях удовлетворительными результатами можно считать расчеты с резюме:

PETERS TEST WAS SATISFIED IN BFGS OPTIMIZATION
SCF FIELD WAS ACHIEVED

Полученные данные имеют как самостоятельную ценность (результаты компьютерного эксперимента), так и могут быть использованы при интерпретации других экспериментальных данных, вплоть до построения многопараметровой модели «структура – свойства».

2.3.5. Программы оценки биологической активности

В настоящее время существует целый ряд компьютерных программ, позволяющих прогнозировать большое число вероятных видов биологической активности вещества на основе его структурной формулы с использованием единого описания химической структуры и универсального математического алгоритма установления зависимостей «структура-активность». Среди них следует выделить программу, которая носит название PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances). Ее современная версия прогнозирует более 700 видов биологической активности по структурной формуле химического вещества, включая основные и побочные фармакологические эффекты, механизмы действия, мутагенность, канцерогенность, тератогенность и эмбриотоксичность (www.ibmh.msk.su/PASS/).

Работа PASS основана на анализе зависимостей «структура-активность» для веществ из обучающей выборки, содержащей более 45000 разнообразных биологически активных веществ (субстанции известных лекарственных препаратов и фармакологически активные соединения). Обучающая выборка постоянно пополняется новой информацией о биологически активных веществах, отбираемой как из публикаций в научно-технической литературе, так и из многочисленных баз данных. Химическая структура представлена в PASS в виде оригинальных MNA дескрипторов (Multilevel Neighbourhoods of Atoms). MNA дескрипторы имеют универсальный характер и с достаточно хорошей точностью описывают разнообразные зависимости «структура-свойства». Используемый в PASS математический алгоритм был отобран путем целенаправленного анализа и сравнения эффективности для решения подобных задач большого числа различных

методов. Показано, что данный алгоритм обеспечивает получение устойчивых в статистическом смысле зависимостей «структура-активность» и соответственно результатов прогноза. Это очень важно, поскольку включенные в обучающую выборку данные всегда обладают определенной неполнотой как в отношении охвата всех химических классов веществ, имеющих конкретный вид активности, так и в отношении изученности каждого отдельного вещества на все возможные виды активности.

Средняя точность прогноза при скользящем контроле составляет свыше 85%. Скользящий контроль проводится следующим образом: из обучающей выборки поочередно удаляется одно вещество и для него делается прогноз на основе анализа оставшейся части обучающей выборки, результат сравнивается с известными экспериментальными данными. Процедура повторяется итеративно для каждого из веществ и рассчитывается средняя точность прогноза. Точность прогноза в 85% достаточна для практического применения системы PASS с целью прогноза спектра биологической активности новых веществ, поскольку ожидаемая вероятность случайного угадывания одного из 780 видов активности составляет около 0.1%.

Результаты прогноза выдаются пользователю в виде списка названий вероятных видов активности с расчетными оценками вероятностей наличия (P_a) и отсутствия каждого вида активности (P_i), которые имеют значения от 0 до 1 (рис. 2.7, пример, гиперссылка). Эти вероятности рассчитываются независимо по подвыборкам активных и неактивных соединений, и поэтому их сумма не равна единице. P_a и P_i интерпретируются как оценки меры принадлежности вещества к классам активных и неактивных соединений соответственно, либо как оценки ошибок первого и второго рода. Чем больше для конкретной активности величина P_a и чем меньше величина P_i , тем больше шанс обнаружить данную активность в эксперименте. В дальнейшем мы будем рассматривать ситуации, когда величина P_a достаточно высока и ее значение значительно превосходит P_i . Если при анализе прогнозируемого списка активностей для исследования выбираются те виды активности, для которых $P_a > 90\%$, то мы рискуем пропустить около 90% действительно активных соединений, но вероятность ложноположительных прогнозов при этом ничтожно мала; для $P_a > 80\%$ – пропустим уже только 80% активных соединений, но и вероятность

ложноположительных прогнозов будет выше, наконец, для $P_a > P_i$ вероятности ошибок первого и второго рода равны.

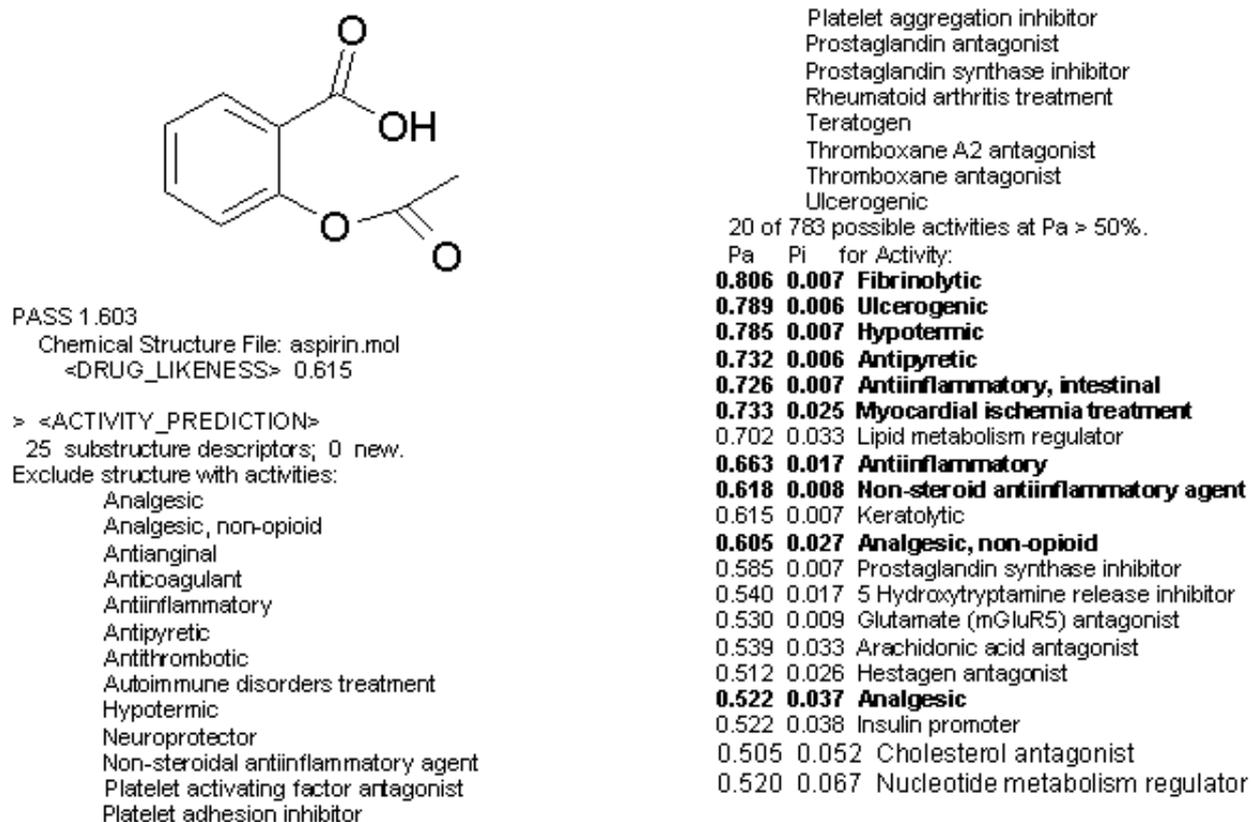


Рис. 2.7. Химическая структура и прогнозируемый с $P_a > 50\%$ спектр биологической активности ацетилсалициловой кислоты (жирным шрифтом выделены известные активности; остальные – целесообразно проверить в эксперименте).

На практике, однако, при отборе для исследования наиболее перспективных веществ руководствуются и другими критериями, например, критерием новизны. При этом исходят из того что, чем ближе значение P_a к единице, тем более вероятно, что вещество является близким аналогом известного препарата. Поэтому, если целью исследователя является выявление соединений с достаточно высоким уровнем новизны (New Chemical Entity, NCE), то надо выбирать вещества, для которых величина прогнозируемой вероятности P_a для требуемого вида активности несколько ниже, например, $0,5 < P_a < 0,7$. При этом доля ложноположительных прогнозов выше, но если активность подтвердится в эксперименте, то будет выявлено NCE.

Базируясь на данных компьютерного прогноза, исследователь может:

- определить, какие тесты наиболее адекватны для изучения биологической активности конкретного химического соединения.
- обнаружить новые эффекты и механизмы действия для ранее изученных веществ;
- отобрать наиболее вероятные базовые структуры новых лекарств с требуемым биологическим действием среди доступных для скрининга химических соединений.

Система PASS позволяет получить прогноз спектра биологической активности 1000 веществ на обычном персональном компьютере менее, чем за одну минуту. Поскольку прогноз выполняется по структурной формуле вещества, он может быть выполнен уже на стадии планирования синтеза.

2.3.6. Наиболее распространенные ГИС

Программные средства ГИС позволяют хранить, эффективно обрабатывать, анализировать и представлять данные, характеризующие положение объектов в пространстве, в том числе на карте. Отсюда их очевидная ценность для экологических и ряда биологических исследований.

Специализированная система MapInfo

Она относится к классу “настольных” ГИС, является хорошей платформой для подготовки разнообразных картографических документов. MapInfo позволяет отображать различные данные, имеющие пространственную привязку. Отличительной особенностью этой ГИС является универсальность. Система дает возможность создавать интегрированные ГИС проекты Intergraph и MapInfo для Windows, Windows NT, UNIX, цифровые картографические системы, программные средства формирования и анализа геоинформационных баз данных.

Возможности ГИС:

- методы анализа данных в реляционной базе данных;
- поиск географических объектов;
- методы тематической закрашки карт;
- методы создания и редактирования легенд;

- поддержка широкого набора форматов данных;
- доступ к удаленным базам данных и распределенная обработка данных.

MapInfo позволяет получать информацию о местоположении по адресу или имени, находить пересечение улиц, границ, производить автоматическое и интерактивное геокодирование, проставлять на карту объекты из базы данных. Информация представляется в виде таблиц, карт, диаграмм, текстовых документов. ГИС дает возможность проводить специальный географический анализ и графическое редактирование. Модули системы включают обработку данных геодезических измерений, векторизацию и архивацию карт, схем, чертежей, преобразования картографических проекций, совмещение пространственных данных.

Система MapInfo включает специализированный язык программирования MapBasic, позволяющий менять и расширять пользовательский интерфейс системы. Эта ГИС дает возможность напрямую использовать данные электронных таблиц Excel, Lotus 1-2-3, форматы dBase и др.

Используя систему MapInfo можно создать карту для представления результатов исследования, импортируя отсканированную рабочую карту или схему. При этом можно импортировать как растровые, так и векторные изображения.

Разработки Института исследований систем окружающей среды (ESRI, US)

ARC/INFO – универсальная, поддерживающая все основные платформы система. Она является основой семейства программных продуктов фирмы ESRI. Система ARC/INFO существует в двух видах: для UNIX и Windows NT и PC ARC/INFO (для работы на персональном компьютере). По своим функциональным возможностям PC ARC/INFO является сужением системы ARC/INFO. Он позволяет вводить и редактировать новую информацию, создавать топологию, выполнять преобразования из проекции в проекцию. ArcView представляет собой ГИС “настольного типа”. ArcView и ARC/INFO могут взаимодействовать в сети и на функциональном уровне. При работе с тематическими данными можно использовать внешние СУБД Oracle, Ingres, Informix, DB2, SQL/400 и т.д. Обеспечивается прямой доступ к

базам данных dBASE, INFO, ASCII с разделителями, а также Oracle, Ingres, Informix, SYBASE. ARC/INFO обладает богатым набором функций пространственного анализа.

Области применения: ведение земельного кадастра, управление землей и недвижимостью; комплексная оценка и управление территориями; управление на транспорте, планирование и оптимизация перевозок; управление природными ресурсами (лесными, водными, недрами); экологический мониторинг, оценка и прогнозирование состояния окружающей среды; маркетинговые исследования; планирование инвестиций; высококачественная картография как топографическая, так и тематическая.

Структура. ARC/INFO состоит из базового комплекта программ и модулей расширения. Базовый комплект – это полнофункциональная ГИС для работы с пространственной информацией. Он поддерживает все операции по созданию и использованию геоинформационной системы, т.е. ввод информации, ее редактирование, организацию пространственных запросов и анализ информации, а также создание качественной картографической продукции. В базовом комплекте расположена также подсистема DATA CONVERSION, которая обеспечивает преобразование данных из проекции в проекцию.

На базе ArcView и ARC/INFO создано большое количество природоохранных картографических систем и баз информационных ресурсов экологической направленности.

2.3.7. Специальные редакторы

Редакторы математических формул

Редактор формул, встроенный в Microsoft Office, является специальной версией редактора формул MathType, разработанного фирмой Design Science Inc. С помощью этого редактора можно создавать сложные формулы, выбирая символы с панели инструментов и вводя переменные и числа. При создании формул размер шрифтов, интервалы и форматы автоматически регулируются в соответствии с правилами записи математических выражений. Изменять форматирова-

ние можно и в процессе работы. Существует также возможность переопределять автоматические стили.

Загрузка редактора формул осуществляется путем вставки в документ объекта типа "Microsoft Equation" (рис. 2.8.). В верхнем ряду панели инструментов расположены кнопки для вставки в формулу более 150 математических символов, большая часть которых недоступна в стандартном шрифте Symbol. Для вставки символа в формулу следует нажать кнопку в верхнем ряду панели инструментов, а затем выбрать определенный символ из палитры под кнопкой.

В нижнем ряду панели инструментов редактора формул расположены кнопки, предназначенные для вставки шаблонов или структур, включающих символы дробей, радикалов, сумм, интегралов, произведений, матриц и различных скобок. Многие шаблоны содержат специальные поля, предназначенные для ввода текста и вставки символов. В редакторе формул имеется около 120 шаблонов, сгруппированных в палитры. Шаблоны можно вкладывать один в другой для построения сложных многоступенчатых формул.

$$H = - \sum_{c=1}^n []$$

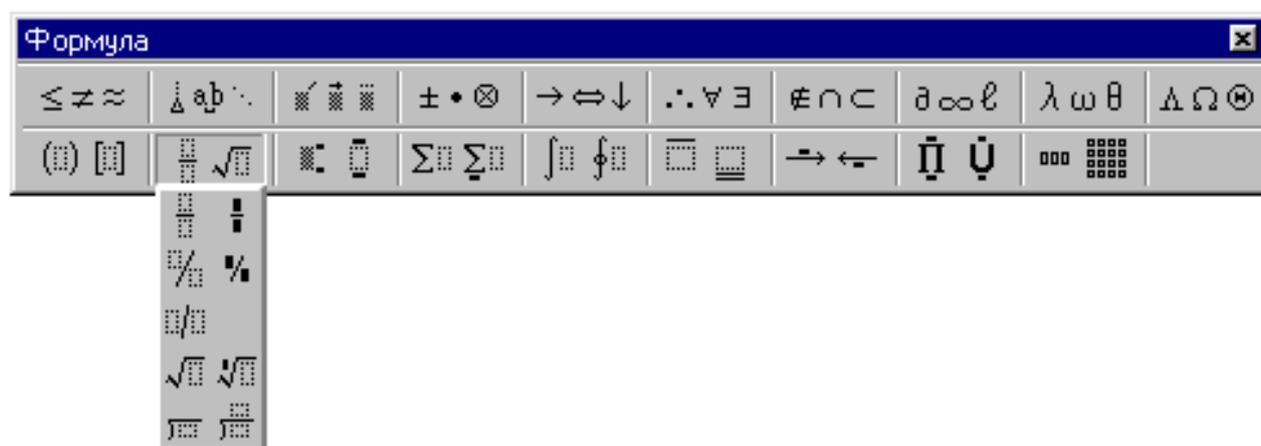


Рис.2.8. Общий вид редактора формул.

Редактор формул MathType является более полной и мощной версией редактора формул. Он так же прост в использовании, однако имеет ряд дополнительных возможностей, ускоряющих работу и повышающих качество документов:

- Набор шрифтов Euclid™ с большим числом математических символов.
- Шаблоны и символы, используемые в геометрии, химии и других областях науки.
- Создание формул для Web-документов.
- Настраиваемые панели инструментов, на которых представлено множество часто используемых символов, выражений, формул.
- Настраиваемые сочетания клавиш.

Редакторы химических формул

Для введения в текст различных химических формул и символов используются специализированные редакторы химических формул. Среди них можно выделить редактор IsisDraw, который является свободно распространяемым. С его помощью можно как вставлять химические формулы и уравнения реакций в текст (например, при использовании MS Word реализуется следующая последовательность команд “Вставка – Объект – Isis/Draw Sketch”), так и готовить наборы уравнений и формул для плакатов.

2.3.8. Графическое оформление результатов и их представление

Программа растровой графики Paint

Для создания простых изображений, включая графики, вполне оправданным является использование встроенного в Windows простого графического редактора Paint. Однако надо помнить, что при создании одноцветного рисунка (а чаще всего при подготовке документа к распечатке требуются именно такие), среди его атрибутов необходимо указать, что он является черно-белым. Это существенно уменьшает размер графического файла.

Программа растровой графики Adobe PhotoShop

Позволяет создавать новые или работать со сканированными изображениями, производить ретуширование, цветокоррекцию, трансформацию и др. Adobe PhotoShop располагает всеми традиционными методами работы с точечными изображениями, при этом имеется возможность работы со слоями.

Мультимедийные пакеты

Результаты научного исследования являются научным продуктом, который с одной стороны необходимо напечатать в виде научного труда (отчета, статьи, курсовой или дипломной работы и т.д.), а с другой – представить "товар лицом" в виде устного сообщения (доклада). В последнем случае для обеспечения демонстрации в аудитории или в сети результатов научного исследования используются мультимедийные пакеты. Для эффективной работы этих программных продуктов необходима соответствующая проекционная аппаратура.

В MS Office для создания демонстрационных материалов (презентаций) имеется специальная программа – Power Point. С помощью нее можно подготовить выступление с использованием слайдов, которые распечатываются на прозрачных пленках, бумаге, 35-миллиметровых слайдах или просто демонстрируются на большом экране через мультимедийный проектор.

Программа предоставляет пользователю большое количество тематических шаблонов презентаций. В эти шаблоны можно вставлять текст, таблицы, графики, схемы, рисунки путем импорта из соответствующих программных продуктов. В итоге Power Point формирует файл презентаций, который имеет расширение PPT и содержит набор слайдов.

2.4. Информационные ресурсы поддержки научной деятельности

Научные ресурсы Интернет по направлениям химии, биологии, экологии очень обширны и разнообразны. Для начинающего пользователя самым трудным является поиск необходимой информации в глобальной компьютерной сети. Каких-то особых правил и рецептов не существует, каждый выбирает свою стратегию и тактику поиска. Можно использовать специальные поисковые системы, а можно просто «блуждать» по Internet, переходя по ссылкам с одного сайта на другой. Однако такой беспорядочный подход очень затратен по фактору времени и не гарантирует успешного решения проблемы. Наш опыт позволяет предложить следующие алгоритмы поиска.

Использование поисковых систем общего назначения: Яндекс, Рамблер и т.п. Предполагается поиск по ключевым словам. Однако попытка получения информации в узкой области редко приводит к быстрому успеху. Требуется применять более общие термины в качестве ключевых слов, что может дать избыточное количество ссылок, но тем не менее не гарантирует удачного решения проблемы. Например, используя для поиска систему Яндекс и введя в качестве ключевых слов «анион-радикалы нитроароматических соединений», Вы получите весьма ограниченное число ссылок по интересующей Вас тематике. Расширив зону поиска (введя ключевые слова «химия анион-радикалов»), Вы получите неизмеримо больше ссылок, но большинство из них будут только информировать об области интересов одного или группы исследователей, не предоставляя собственно научную информацию. Однако есть шанс, что, таким образом, удастся наткнуться и на оригинальные научные статьи и тезисы докладов.

Для более успешного поиска необходимо учитывать то, что основной объем научной информации сосредоточен на серверах вузов, научно-исследовательских институтов, библиотек, музеев, государственных и общественных организаций. Прежде всего необходимо найти сервер той организации, которая предположительно занимается Вашей проблемой. Вы можете использовать для этого поисковые системы общего назначения. Сайты российских вузов можно обнаружить среди информационных ресурсов Министерства образования РФ либо на сайте www.informika.ru. Следует также отметить, что сер-

веры большинства образовательных и научных организаций имеют собственные системы поиска и наборы ссылок на сходные информационные ресурсы.

Особо следует выделить электронные библиотеки, базы научных данных, сайты журналов и сайты научных обществ. Именно эти ресурсы являются наиболее ценными для поиска актуальной научной информации и снабжены, как правило, эффективным поисковым сервисом. Не следует забывать и тематические порталы, хотя там сконцентрирована информация более ценная для образовательной деятельности.

Теперь мы более подробно рассмотрим научные ресурсы Интернет по направлениям химии, биологии, экологии. Будут представлены лишь основные, зарекомендовавшие себя как стабильные, источники научной информации. Подробный каталог ссылок в рамках настоящего пособия лишен смысла, т.к. многие сайты не актуализируются и не поддерживаются.

Как один из основных, содержащих новейшую научную информацию по многим областям химии, биологии и экологии, следует отметить сайт Электронные библиотеки РФФИ (адрес elibrary.ru). Для работы с ресурсами требуется персональная регистрация. Все условия доступа обозначены на титульной странице. Достоинством электронных библиотек является не только постоянно актуализируемая информация (новые номера научных журналов), но и эффективная система поиска. Возможен отбор информации по авторам и ключевым словам. Причем поиск последних возможен как в названиях, так и в рефератах статей и в полнотекстовых ресурсах. Немаловажным достоинством является возможность получения текстов самих статей в PDF формате по электронной почте. Все это делает электронные библиотеки мощным средством компьютерной поддержки научных исследований.

Биологические и экологические ресурсы Internet

Основной объем биологической и экологической информации сосредоточен на сайтах ВУЗов, научно-исследовательских институтов, библиотек, музеев, государственных и общественных организаций.

Биологические ресурсы Internet представлены, в основном, многочисленными тематическими (энтомология, генетика, гидробиоло-

гия, ихтиология и др.) и таксономическими базами данных (филогения, списки растений и животных, Красные книги и т.д.).

В качестве примеров можно привести базы данных Института зоологии РАН (http://www.zin.ru/anim_r.htm), научные и образовательные ресурсы Института биологии внутренних вод РАН (<http://www.ibiw.yaroslavl.ru/>), "Дерево жизни" – "The Tree of Life Web Project" (<http://tolweb.org/tree/phylogeny.html>). Выход на англоязычные ихтиологические информационные ресурсы удобно осуществлять через <http://www2.biology.ualberta.ca/jackson.hp/IWR/index.php>. Здесь собраны научные и образовательные сетевые ресурсы по ихтиологии. Интерактивно поддерживаются связи со страницами, касающимися различных разделов ихтиологии. Имеются ссылки на ихтиологические общества, институты, государственные учреждения, музеи, и т.д.

Доступ к экспозициям музеев биологического профиля можно получить на сайте «Музеи России» (<http://www.museum.ru>):

- Государственный Дарвиновский Музей
- Государственный Биологический музей имени К.А. Тимирязева
- Научно-исследовательский Зоологический музей МГУ
- Зоологический музей Зоологического института РАН
- Ботанический сад МГУ "Аптекарский огород"
- Московский Палеонтологический музей.
- Биологические коллекции Ярославского государственного университета им. П.Г.Демидова (зоологический музей, гербарий, коллекция водных олигохет) представлены на сайте [://www.uniyar.ac.ru/publish/biostudy/index.ru.htm](http://www.uniyar.ac.ru/publish/biostudy/index.ru.htm).

На экспозиции музея палеонтологии Калифорнийского университета можно попасть по адресу: <http://www.ucmp.berkeley.edu>.

Доступ к российским **экологическим ресурсам Internet** удобно реализовать с помощью Российского национального портала природно-ресурсной и экологической информации. Здесь представлена информация по всем видам природных ресурсов в субъектах РФ, библиография, атлас тематических карт, Электронная библиотека, справочная информация (экологические новости, государственные органы контроля и надзора, справки по состоянию окружающей среды во всех регионах РФ), юридическая консультация, форумы.

Кроме того, сведения по экологическим ресурсам Internet довольно хорошо представлены на сервере Открытой Справочно-

информационной Службы "Ecoline" Социально-экологического Союза (<http://www.ecoline.ru>). Здесь можно найти оригинальные источники информации по проблемам охраны окружающей среды в России и СНГ, базы данных по экологическим организациям, источники информации о фондах и благотворительных организациях в Internet, посетить Московскую открытую экологическую библиотеку, ссылки на другие экологические ресурсы Internet.

В англоязычной части Internet значительный объем экологической информации содержится в виртуальной библиотеке «Ecology, Biodiversity and the Environment» по адресу <http://conbio.rice.edu/vl>.

Все вопросы, касающиеся разработки и использования геоинформационных систем (ГИС), можно разрешить, обратившись к серверу ГИС-ассоциации (<http://www.ru/gisa/win/russian.htm>).

Химические ресурсы Internet

Наиболее полным из русскоязычных химических ресурсов является сервер химического факультета МГУ (<http://www.chem.msu.su:8081/rus/>). Он содержит огромный объем информации по химической науке и образованию. Там же расположен сайт ChemNet. На нем размещаются основные новости химии – как в области образования, так и науки. ChemNet включает ссылки на организации, исследовательские и образовательные учреждения, базы данных, журналы, электронные конференции по химии. Это один из самых полных русскоязычных Интернет-каталогов по химии.

Из англоязычных ресурсов Интернет наиболее актуальным для химиков является сайт Американского химического общества: <http://www.acs.org/>. На нем размещено большое количество ведущих химических журналов. Имеется система поиска необходимой публикации по ключевым словам в заглавиях статей. Доступ к полнотекстовым документам платный, однако, как минимум один раз в год статьи журналов Американского химического общества открываются для просмотра и копирования. Об этом заранее извещается в новостях сайта. Поэтому является целесообразным вести каталог необходимых статей, чтобы в нужный момент быть готовым скопировать их.

Не менее интересным является сайт Королевского химического общества: <http://www.rsc.org>. Он также поддерживает целый ряд электронных химических журналов.

И, наконец, из крупных ресурсов для ученых-химиков следует отметить форум ChemWeb, который информирует о новостях химической науки и образования, предоставляет ссылки на открытые научные публикации, например, справочник Бельштейна (аннотации статей по органической химии с 1980 года).

Ресурсы Internet по обработке и анализу данных

На англоязычные ресурсы Internet, касающиеся применения математических методов в биологии, можно выйти через <http://archives.math.utk.edu/mathbio>. Для получения сведений по биоинформатике стоит обратиться к серверу Стэнфордского университета (<http://dna.stanford.edu/motif>).

Русскоязычная часть Internet в этой области знаний представлена большим количеством сайтов общего и специального назначения.

www.statistica.ru – "Статистический портал" компании StatSoft Russia. Он содержит самую подробную информацию о современных методах анализа, прогнозирования, классификации, визуализации и добычи данных.

На портале находятся электронные учебники по статистике: "Электронный учебник", содержащий описание модулей системы Statistica, "Электронный учебник по промышленной статистике" (это тот же учебник, дополненный разделами "Планирование эксперимента" и др.), а также "Углубленный учебник по статистике".

В разделе "Аннотации и рефераты статей" – информация об интересных научных статьях по анализу данных в различных областях, опубликованных в известных научных изданиях.

Электронный учебник по статистике компании StatSoft (<http://www.statsoft.ru/home/textbook/default.htm>) (рис. 2.9.). Учебник помогает начинающим пользователям разобраться в основных понятиях статистики и более полно представить диапазон применения статистических методов.

В учебнике приводится большое количество примеров применения статистики в различных областях науки, включая лабораторные исследования, сбор и разведочный анализ данных, прогнозирование и многое другое.

Электронный учебник начинается с обзора элементарных понятий, а затем, более подробно описываются отдельные области ис-

пользования статистики. Их описание организовано в виде текстовых модулей, каждый из которых соответствует некоторому классу аналитических методов. Учебник также включает подробный словарь статистических терминов и "статистический советник".

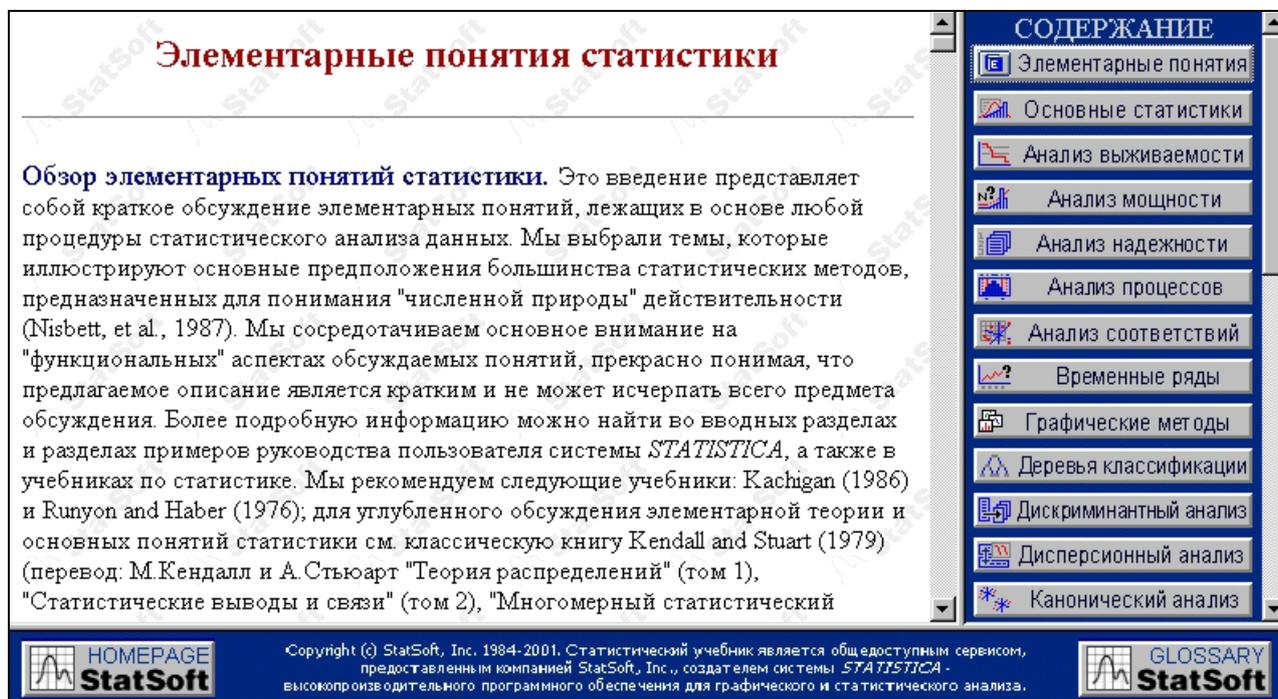


Рис. 2.9. Общий вид страницы электронного учебника по статистике

"Статистический советник" – это специально разработанная программа, позволяющая пользователю ориентироваться в разнообразных методах, реализованных в системе Statistica. На основании ответов на последовательно заданные вопросы относительно структуры имеющихся данных и стоящей перед исследователем задачи, "Статистический советник" предлагает статистические методы, которые целесообразно использовать, и укажет, где они находятся в системе Statistica.

www.biometrica.tomsk.ru – "Биометрика" (электронный журнал для медиков и биологов). Журнал "Биометрика" адресован тем, кто занимается экспериментальными исследованиями в области медицины и биологии. Он может быть полезен всем тем, кто проводит статистический анализ экспериментальных данных.

Цель материалов, публикуемых в этом журнале, – показать настоятельную необходимость широкого использования методов био-

метрики в отечественной биомедицине. Для этой цели в журнале публикуются материалы разной направленности: учебные и научные статьи, перечень ресурсов Internet по статистике и биометрике, критический разбор наиболее типичных ошибок и заблуждений, встречающихся на страницах диссертаций, монографий и журналов, материалы для желающих пройти дистанционное обучение биометрике и т.д.

www.exponenta.ru – образовательный математический сайт. Чтобы решить задачу, здесь можно:

- поискать свою или похожую задачу по математическому анализу, линейной алгебре, аналитической геометрии, обыкновенным дифференциальным уравнениям, теории вероятностей, вычислительной математике среди разобранных примеров (в разделе Internet-класс по высшей математике);

- запустить установленный у Вас математический пакет, выбрать в списке примеров, решенных в среде этого пакета, подходящий и решить свою задачу по аналогии;

- найти в банке решенных студенческих задач свою;

- задать свой вопрос для обсуждения на форуме;

- и, наконец, отправить вопрос по e-mail, воспользовавшись электронной консультацией.

Используя указанные ресурсы Интернет, а также поисковые системы общего назначения, можно ознакомиться с большинством электронных ресурсов поддержки научной деятельности.

Заключение

Таким образом, представленные в пособии электронные ресурсы и методы их использования в учебном процессе могут значительно повысить эффективность образовательных процедур по самым различным направлениям, формируя при этом у обучаемых полезный навык работы с новыми информационными и телекоммуникационными технологиями.

Оглавление

Введение	3
1. Новые информационные и телекоммуникационные технологии в учебном процессе.....	4
1.1. Особенности применения новых информационных технологий в учебном процессе	4
1.2. Основные направления применения новых информационных технологий в образовательном процессе	7
1.3. Электронная среда системы естественнонаучного образования	10
1.3.1. Структура локальной электронной среды	10
1.3.2. Региональное и национальное информационно-образовательное пространство на базе Интернет-технологий.....	14
1.4. Особенности реализации электронных курсов химической, биологической и экологической тематики	20
1.5. Электронные обучающие системы для отдельных компьютеров и локальных сетей.....	24
1.6. Электронные обучающие системы на основе Интернет-технологий в школьном образовании.....	41
1.7. Электронные обучающие системы на основе Интернет-технологий в высшем образовании.....	53
1.8. Заключение.....	68
2. Компьютерные технологии, применяемые в научных исследованиях	71
2.1. Общая схема компьютерного обеспечения основных этапов научного исследования	71
2.2. Этапы научного исследования	74

2.3. Основные программные продукты, применяемые в химических, биологических, экологических исследованиях	92
2.3.1. Текстовые редакторы	92
2.3.2. Электронные таблицы MS Excel	93
2.3.3. Пакет прикладных программ Statistica.....	95
2.3.4. Программные комплексы квантово-химического моделирования.....	102
2.3.5. Программы оценки биологической активности.....	106
2.3.6. Наиболее распространенные ГИС	109
2.3.7. Специальные редакторы	111
2.3.8. Графическое оформление результатов и их представление	113
2.4. Информационные ресурсы поддержки научной деятельности.....	115
Заключение.....	121

Учебное издание

Орлов Владимир Юрьевич
Русаков Александр Ильич
Тихонов Сергей Владимирович

**Компьютерные технологии
в образовательной и научной деятельности**

Учебное пособие

Редактор, корректор А.А. Аладьева
Компьютерная верстка И.Н. Ивановой

План 2003 г.

Подписано в печать 19.05.2005 г. Формат 60×84/16.

Бумага тип. Усл. печ. л. 7,21. Уч.-изд. л. 5,01.

Тираж 150 экз. Заказ .

Оригинал-макет подготовлен
в редакционно-издательском отделе ЯрГУ.

Ярославский государственный университет
150000 Ярославль, ул. Советская, 14

Отпечатано
ООО «Ремдер» ЛР ИД № 06151 от 26.10.2001
г. Ярославль, пр. Октября, 94, оф. 37 тел. (0852) 73-35-03