

Лекция 3

Информационные технологии в науке

ПО в науке

- 92% of academics use research software
- 69% say that their research would not be practical without it
- 56% develop their own software
(worryingly, 21% of those have no training in software development)
- 70% of male researchers develop their own software, and only 30% of female researchers do so



How many researchers use software?

It's not overstating the case to say that software is vital to research. If we were to magically remove software from research, 7 out of 10 researchers would be out of a job.

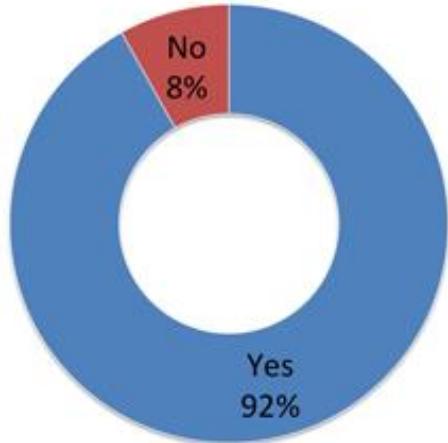
92% of respondents said they used research software. More importantly, 70% of respondents said that "It would not be practical to conduct my work without software".

<https://www.software.ac.uk/blog/2014-12-04-its-impossible-conduct-research-without-software-say-7-out-10-uk-researchers>

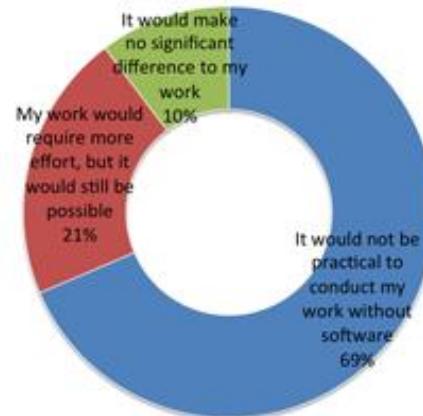
<https://www.mccme.ru/~ansobol/soft/index.html>

ПО в науке

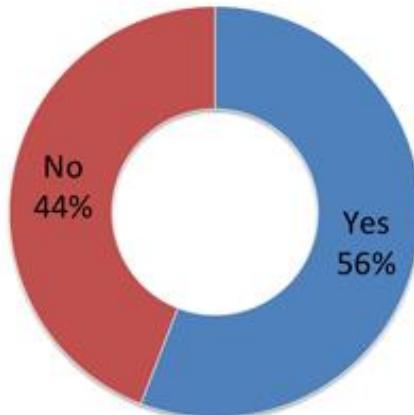
Do you use research software?



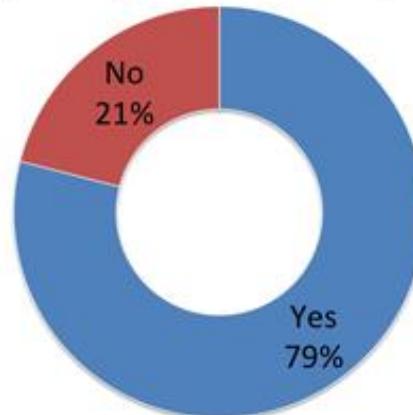
What would happen if you could no longer use research software?



Do you develop your own research software?



If you develop software, have you received any training in software development?



ПО в науке

A lot of different software is being used: we recorded 566 different packages - some of them have only one user within our surveyed community, some with many. The most popular packages are Matlab (20% of respondents use it), R (16%), SPSS (15%), then Excel (12%).

SPSS Statistics (аббревиатура [англ.](#) «Statistical Package for the Social Sciences» — «статистический пакет для социальных наук») — [компьютерная программа](#) для [статистической обработки](#) данных, один из лидеров рынка в области коммерческих статистических продуктов, предназначенных для проведения прикладных исследований в [социальных науках](#).

R — [язык программирования](#) для статистической обработки данных и работы с графикой, а также [свободная](#) программная среда вычислений с открытым исходным кодом в рамках проекта [GNU](#).

There is a difference, albeit not a great one, when it comes to simply using research software: 88% of Windows users are also users of research software, as compared to 93% for OS X and a remarkable 98% for Linux.

“No one knows how much software is used in research. Look around any lab and you’ll see software – both standard and bespoke – being used by all disciplines and seniorities of researchers. Software is clearly fundamental to research, but we can’t prove this without evidence.”

Процесс научного исследования заключает:

1. Изучение имеющихся знаний

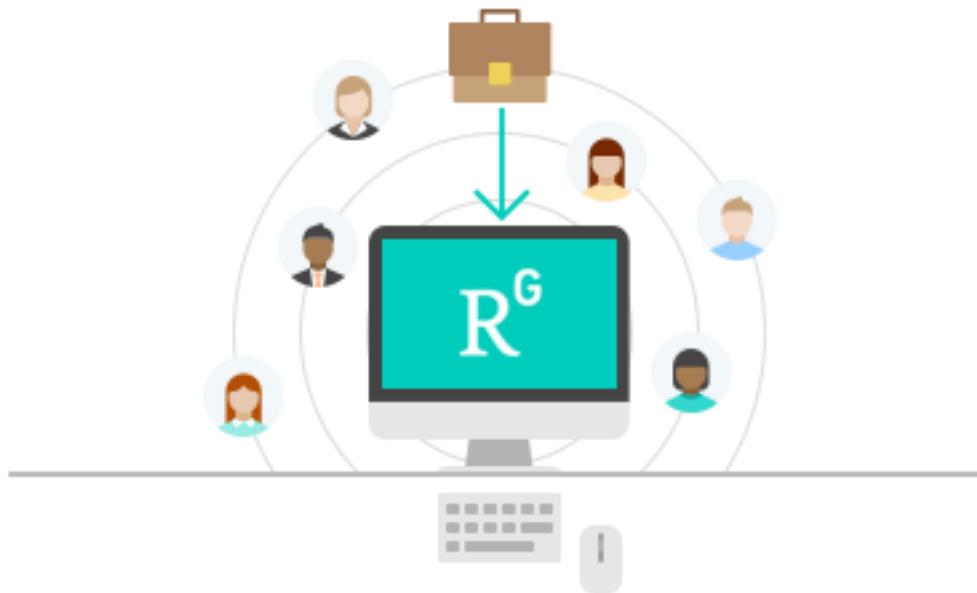
- а) Поиск литературы**
- б) Работа с литературой**
- в) для автоматического перевода текстов**
- г) хранения и накопления информации**
- д) для планирования процесса исследования**
- е) общения с ведущими специалистами**

2. Теоретическое осмысление

- 3. Проведение эксперимента, опыта, моделирования**
- 4. Анализ и оформление результатов**
- 5. Демонстрация и внедрение результатов**

Поиск литературы: research gate

ResearchGate



<https://www.researchgate.net>

Поиск литературы: e-library



ПОИСК

Найти

Расширенный поиск

ВХОД

IP-адрес компьютера:
145.255.9.220

Название организации:
не определена

Имя пользователя:

Пароль:

Вход

НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА eLIBRARY.RU

ЧИТАТЕЛЯМ | ОРГАНИЗАЦИЯМ | ИЗДАТЕЛЬСТВАМ | АВТОРАМ | БИБЛИОТЕКАМ

ОСНОВНЫЕ ПРОЕКТЫ НА ПЛАТФОРМЕ eLIBRARY.RU

Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - это крупнейший российский информационно-аналитический портал в области науки, технологий, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 26 млн научных статей и публикаций, в том числе электронные версии более 5600 российских научно-технических журналов, из которых более 4800 журналов в открытом доступе. Подробнее...

ROSSIYSKII INDEKS NAUCHNOGO CITIROVANIIA

Национальная библиографическая база данных научного цитирования, аккумулирующая более 12 миллионов публикаций российских ученых, а также информацию о цитировании этих публикаций из более 6000 российских журналов

SCIENCE INDEX DLA ORGANIZACIJ

Информационно-аналитическая система Science Index для анализа публикационной активности и цитируемости научных организаций

SCIENCE INDEX DLA AUTOROW

Инструменты и сервисы, предлагаемые для зарегистрированных авторов научных публикаций

RUSSIAN SCIENCE CITATION INDEX

Совместный проект компаний Thomson Reuters и Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - коллекция лучших российских журналов на платформе Web of Science

НОВОСТИ И ОБЪЯВЛЕНИЯ

31.08 Открыта регистрация на конференцию SCIENCE ONLINE XXI

22.06 Опубликованы презентации семинара: "Scientific Publication: Where, Why, and How" от 25-26 мая 2017 г.

19.05 Заявление Совета по науке при Министерстве образования и науки РФ о формировании "Перечня ВАК"

28.04 Исключение журналов из РИНЦ, ретракция статей и открытые рецензии: вопросы и ответы

Другие новости

ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

Число наименований журналов:	60692
Из них российских журналов:	15034
Из них выходящих в настоящее время:	12935
Число журналов, индексируемых в РИНЦ:	5659
Число журналов с полными текстами:	10528
Из них в открытом доступе:	5362
Из них российских журналов:	5704
Из них российских журналов в открытом доступе:	4883



XXI Международная конференция
SCIENCE ONLINE: электронные
информационные ресурсы
для науки и образования
Австрия, 27 января - 3 февраля
2018 г.

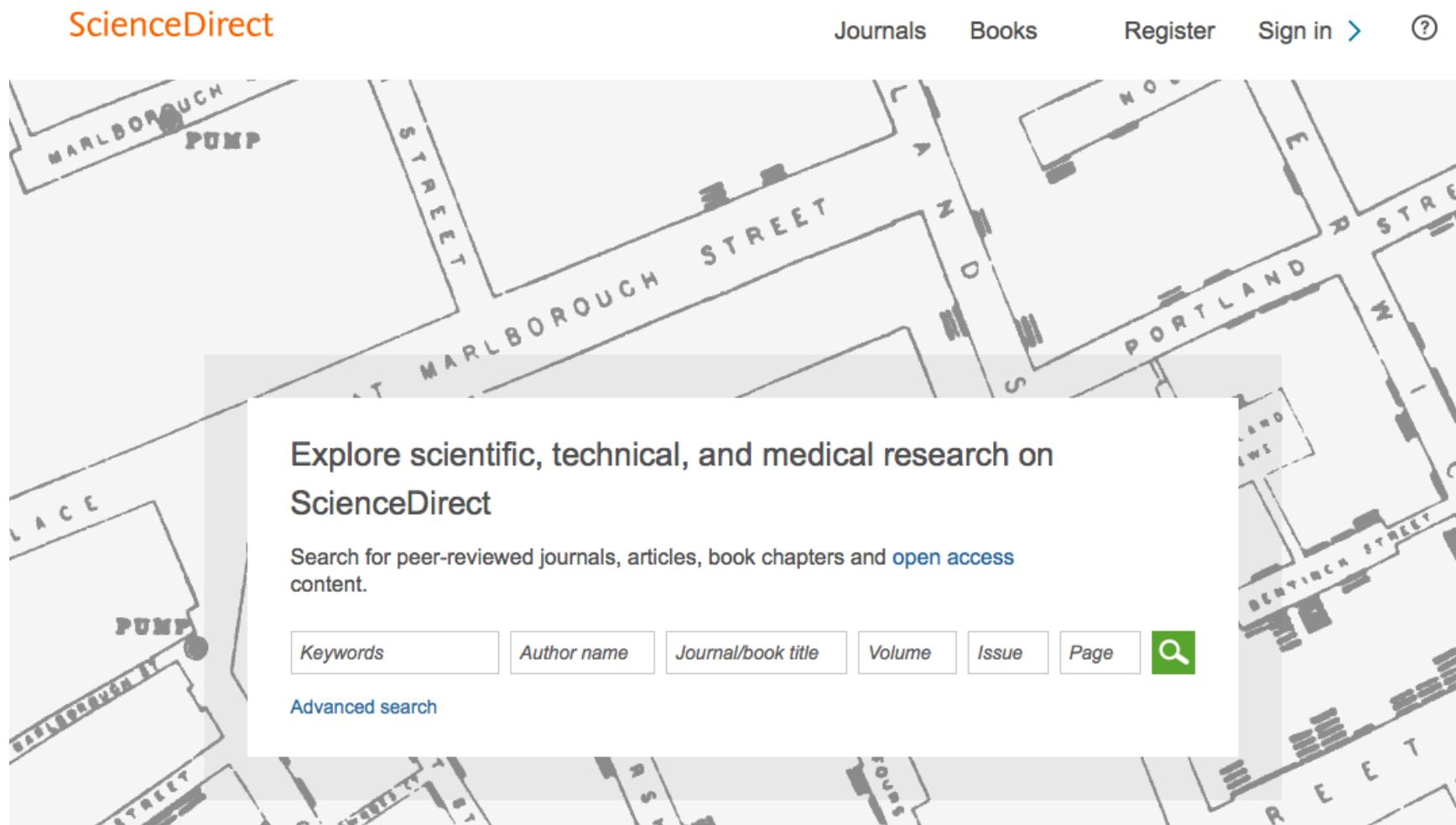


Примите участие в экспертной
оценке качества российских
научных журналов

<https://elibrary.ru>

7

Поиск литературы: science direct



<http://www.sciencedirect.com>

Поиск литературы: поисковые системы

Google™

Яндекс

YAHOO!®

Rambler®

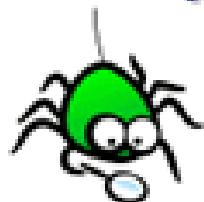
bing

gogo^{beta}

Webalta

i.ua

<META>[®]

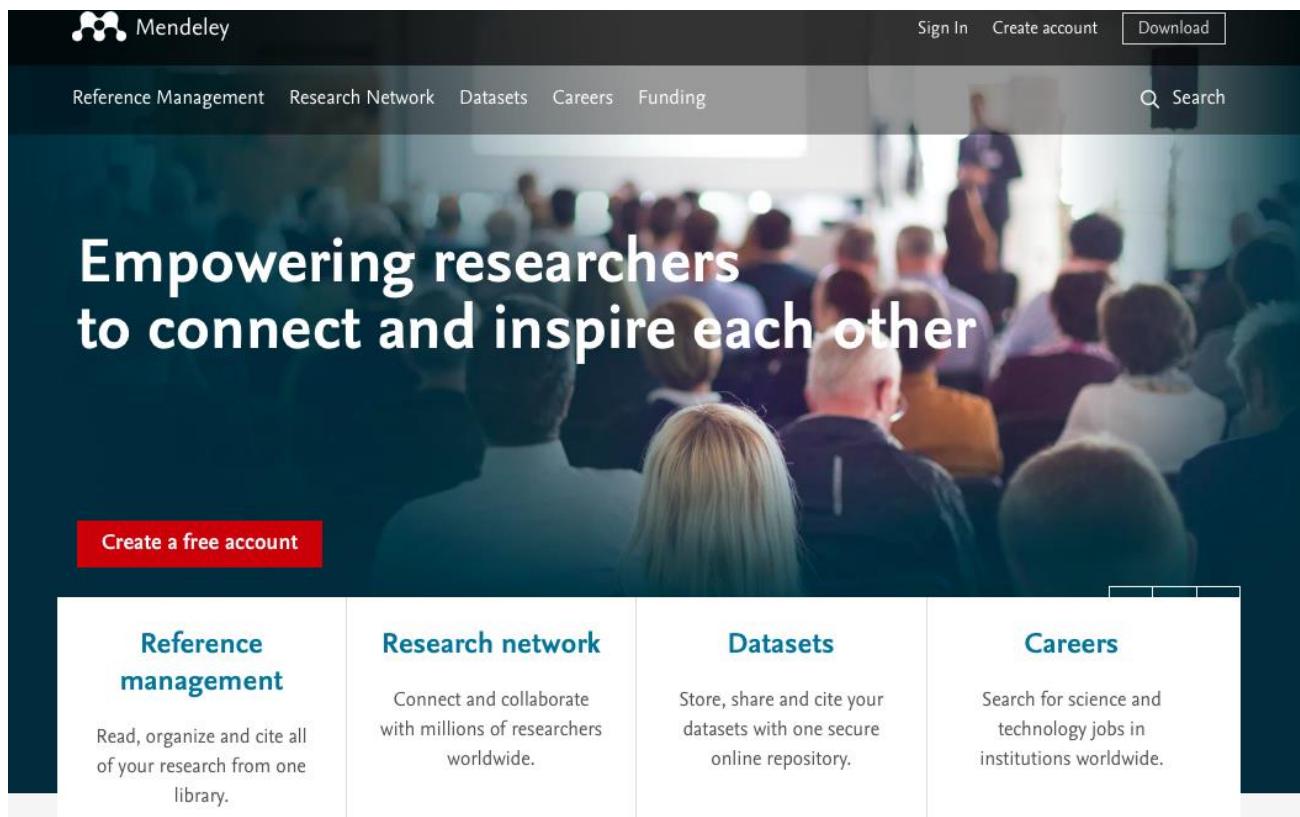


NIGMA.RU
интеллектуальная поисковая система

АПОРТ
ищет что надо

Работа с литературой: Mendeley

Mendeley - это уникальное решение объединяющее в себе reference manager (средство сбора и каталогизации научных статей для последующей подготовки пристатейных списков), а также профессиональная научная социальная сеть



https://lit-review.ru/guides/Mendeley_guide.pdf

https://www.youtube.com/watch?v=rcao4Wh_ui0

Поиск литературы: scopus

Scopus Preview

[Поиск авторов](#) Источники Помощь ▾ [Зарегистрироваться >](#) Войти

Поиск профиля автора

Scopus is the world's largest abstract and citation database of peer-reviewed research literature. With over 22,000 titles from more than 5,000 international publishers.

You can use this free author lookup to search for any author; or, use the [Author Feedback Wizard](#) to verify your Scopus Author Profile.
Register for your unique ORCID and use Scopus to [import your records](#).

Фамилия автора

например, *Smith*

Имя автора

например, *J.L.*

Организация

например, *Toronto University*

Показывать только точные совпадения

Поиск Q

id ORCID

например, *1111-2222-3333-444X*

Поиск Q

<https://www.scopus.com/freelookup/form/author.uri>

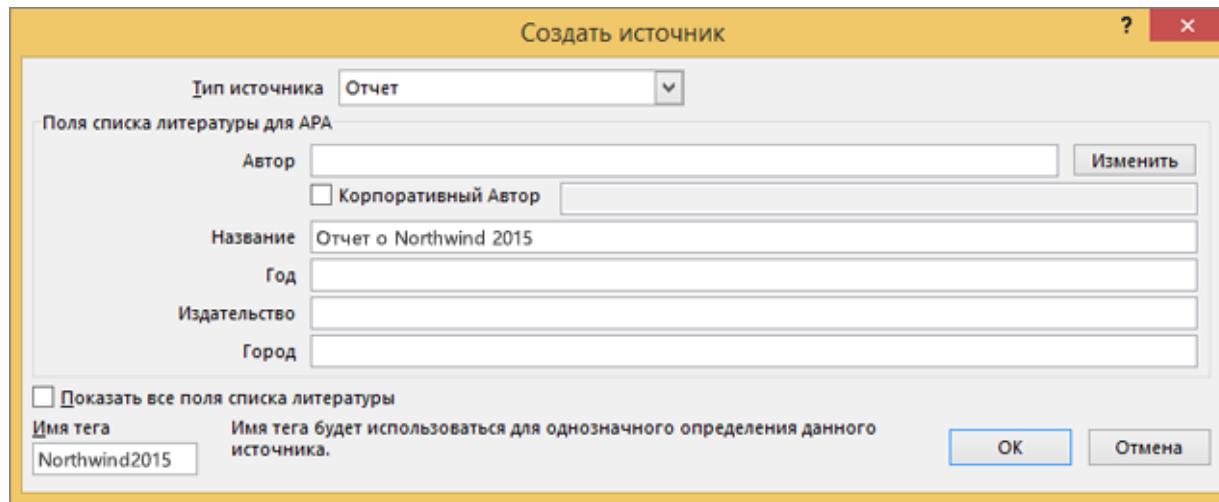
Работа с литературой: Word, LaTex

- составления библиографии — составления перечня источников, отобранных для работы в связи с исследуемой проблемой;
- реферирования — сжатого изложения основного содержания работы;
- конспектирования — ведения более детальных записей, основу которых составляют выделение главных идей и положений работы;
- аннотирования — краткой записи общего содержания книг или статей;
- цитирования — дословной записи выражений, фактических или цифровых данных, содержащихся в литературном источнике.



Работа с литературой:

The screenshot shows the Microsoft Word ribbon with the 'Ссылки' (References) tab selected. The 'Ссылки' tab has a red box around it. Below the ribbon, a context menu for a reference entry is open, also with a red box around its title. The menu items include 'Вставить концевую сноску' (Insert Endnote), 'Следующая сноска' (Next Note), 'Показать сноски' (Show Notes), 'Стили: APA' (Styles: APA), 'Список литературы' (List of References), and 'Ссылки и списки литературы' (References and Bibliographies).



The screenshot shows the Microsoft Word ribbon with the 'Ссылки' (References) tab selected. A context menu is open over a reference entry in the list, with a red box around its title. The menu items are identical to the ones shown in the first screenshot: 'Вставить концевую сноску', 'Следующая сноска', 'Показать сноски', 'Стили: APA', 'Список литературы', and 'Ссылки и списки литературы'. The reference entry itself is highlighted with a red box and displays the text 'Northwind1' and 'Отчет о Northwind'.

Работа с литературой: LaTeX

LaTeX – это процессор, на входе принимающий язык разметки, на выходе дающий PDF с готовым документом. Язык разметки говорит процессору, что в документе что, где картинки и зачем, автоматически верстаются таблицы, картинки, ссылки на них, оглавление, индекс, сноски и т.д. Идеальный инструмент для совместной работы, для сложных больших документов, с графиками и формулами, в которые могут внести серьезные правки в середину за полчаса до печати и надо успеть. Также могут быть вынесен отдельно стиль, как CSS в HTML. Автор сосредоточен на контенте, а при публикации применяются стили документа, куда включена статья автора. По этим причинам все математические и физические журналы верстаются только в LaTeX.

LaTeX.

<https://pastebin.com/eqM1f2AY>

PDF с готовым документом

<https://ru.scribd.com/document/150034805/RaufAliev-CV-Full>

Работа с литературой: LaTeX

LaTeX – это процессор, на входе принимающий язык разметки, на выходе

The screenshot shows the Kile LaTeX editor interface. On the left, the 'Structure' panel displays a tree view of the 'tutorial.tex' file, including sections like 'Introduction', 'User Authentication', and 'Special Topics'. The main editing area shows the LaTeX code for the document. The right side of the interface contains a preview window displaying the rendered LaTeX output.

```
\title{\textbf{Botan Tutorial}}
\author{Jack Lloyd \\
        \texttt{lloyd@randombit.net}}
\date{2009/07/08}

\newcommand{\filename}[1]{\texttt{\#1}}
\newcommand{\manpage}[2]{\texttt{\#1}(\#2)}
\newcommand{\macro}[1]{\texttt{\#1}}
\newcommand{\function}[1]{\textbf{\texttt{\#1}}}
\newcommand{\type}[1]{\texttt{\#1}}
\renewcommand{\arg}[1]{\texttt{\#1}}
\newcommand{\variable}[1]{\texttt{\#1}}
\usepackage{hyperref}
\begin{document}

\maketitle
\tableofcontents
\parskip=5pt
\pagebreak
\error
\section{Introduction}

This document essentially sets up various simple scenarios and then shows how to solve the problems using Botan. It's fairly simple, and doesn't cover many of the available APIs and algorithms, especially the more obscure or unusual ones. It is a supplement to the API documentation and the example applications, which are included in the distribution.

To quote the Perl man page: ``There's more than one way to do it.''
Divining how many more is left as an exercise to the reader.

This is \emph{not} a general introduction to cryptography, and most simple terms and ideas are not explained in any great detail.

\end{document}
```

Pipe pipe(new MAC_Filter("HMAC(SHA-256)", mac_key),
 new Hex_Encoder
);
 std::cout << the_salt.to_string(); // hex encoded
 pipe.start_msg();
 infile >> pipe;
 pipe.end_msg();
 std::cout << pipe.read_all_as_string() << std::endl;

4.3 User Authentication

Doing user authentication off a shared passphrase is fairly easy. Essentially, a challenge-response is used - the server sends a random challenge, and the client responds with an appropriate response. The idea is that only someone who knows the passphrase can generate or check to see if valid.

Let's say we use 160-bit (20 byte) challenges, which seems fairly reasonable. We can create them using the global random number generator (RNG):

```
byte challenge[20];
Global_RNG::randomize(challenge, sizeof(challenge), Nonce);
// send challenge to client
```

After reading the challenge, the client generates a response based on the challenge and the passphrase. In this case, we will do it by repeatedly hashing the challenge, the passphrase, and (if applicable) the digest. We iterate this construction 4096 times, to make brute force attacks on the passphrase difficult. Since we are already using 160-bit challenges, a 160-bit response seems warranted, so we'll use 7 bytes.

```
HashFunction* hash = get_hash("SHA-1");
SecureVector<byte> digest;
for(u32bit j = 0; j != 4096; j++)
{
    hash->update(digest, digest.size());
    hash->update(passphrase);
    hash->update(challenge, challenge.size());
}

digest = hash->final();
}
delete hash;
// send value of digest to the server
```

Upon receiving the response from the client, the server computes what the response should be based on the challenge it sent out, and the passphrase. If the two responses match, the client is authenticated.

Текстовые редакторы

Текстовые редакторы для программирования: Sublime Text editor, Vim, Atom, Visual Studio Code, Notepad ++, Gedit, TextPad, Geany, Komodo Edit, Light Table и др.

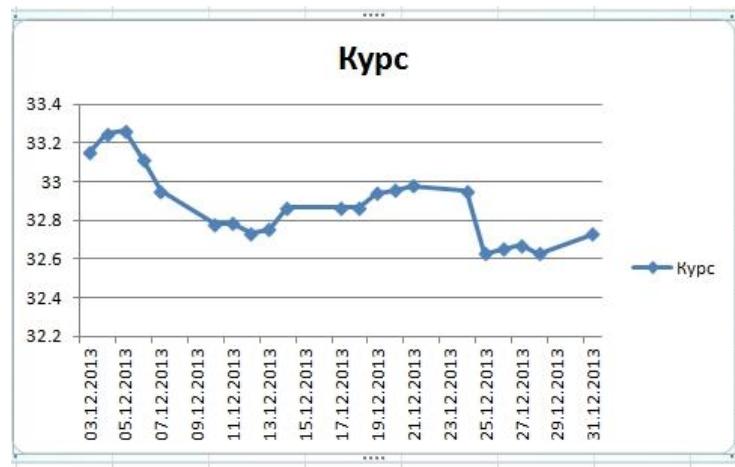
Простые текстовые редакторы: Блокнот, WordPad, LopeEdit Lite, TED Notepad, AkelPad, Dolphin Text Editor Menu, UltraEdit и др.

Современный текстовый процессор, кроме обычных функций редактирования электронных текстов, в том числе и их форматирования (в том числе и ускоренного, такого как автозамена и ввод автотекста), должен «уметь» работать с таблицами и изображениями, поддерживать стили и шаблоны для ускоренного создания однотипных документов, иметь средства проверки орфографии и грамматики. Кроме того, крайне желательны такие вспомогательные функции, как редактор формул, ведение статистики, вычисление математических выражений и др.

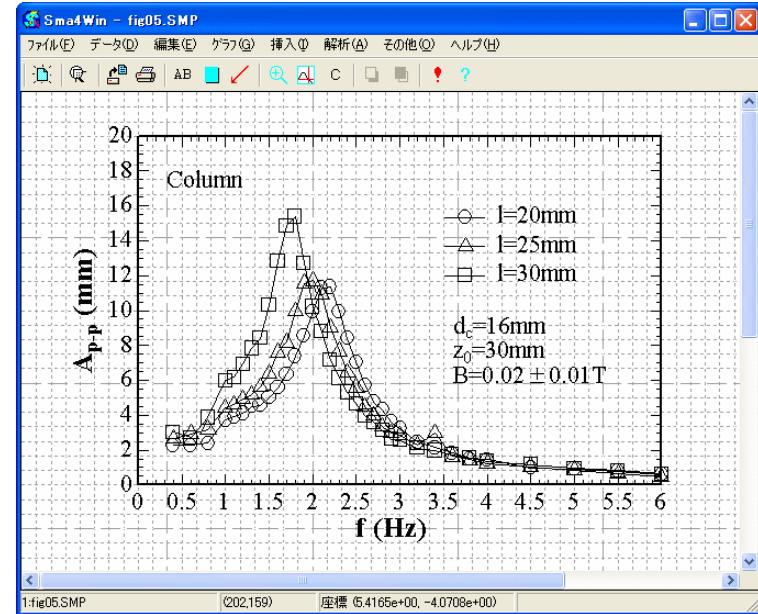


Notepad ++ является редактором с открытым исходным кодом, поддерживает тонны языков программирования. Самое большое преимущество Notepad++ над многими текстовыми редакторами, является тот факт, что он может оперировать большими файлами без каких-либо серьезных задержек и сбоев. Кроме того, его функциональность может быть расширена при помощи сотен доступных плагинов.

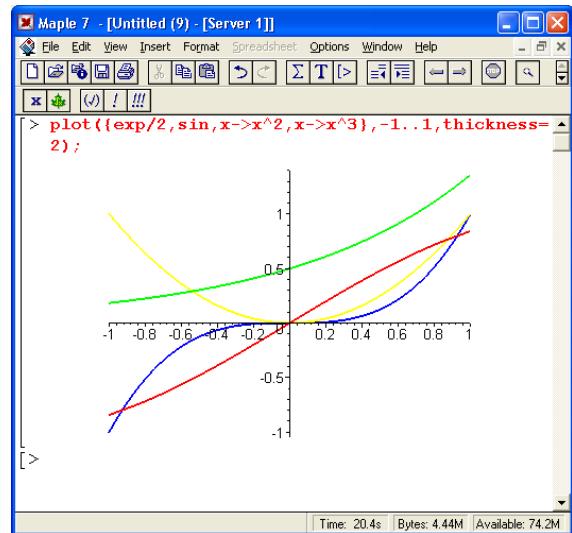
Построение графиков: «publication quality»?



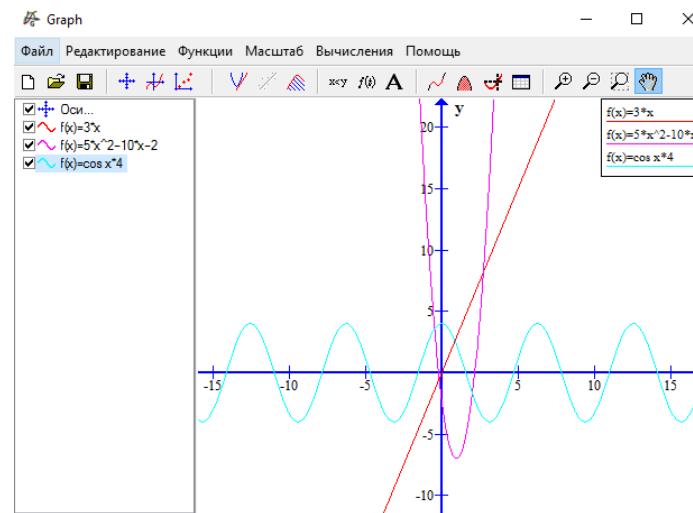
MS Excel



Sma4Win



Maple



Graph

Построение графиков: «publication quality»?

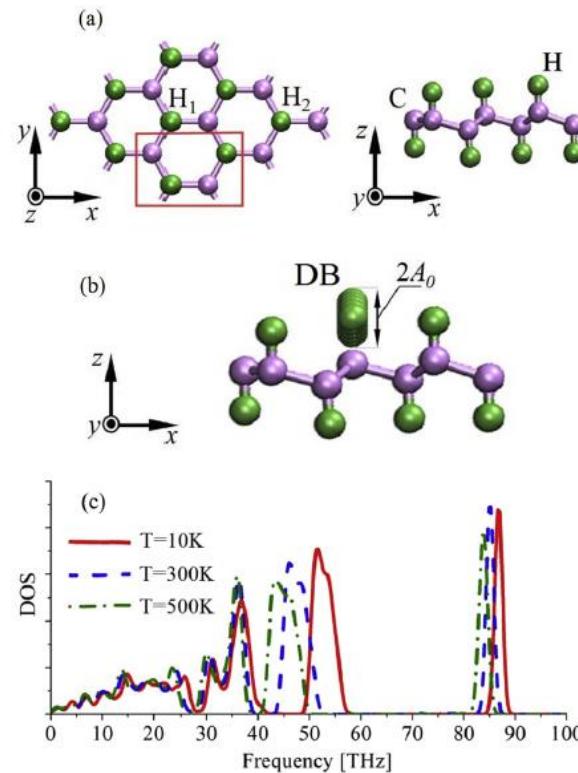
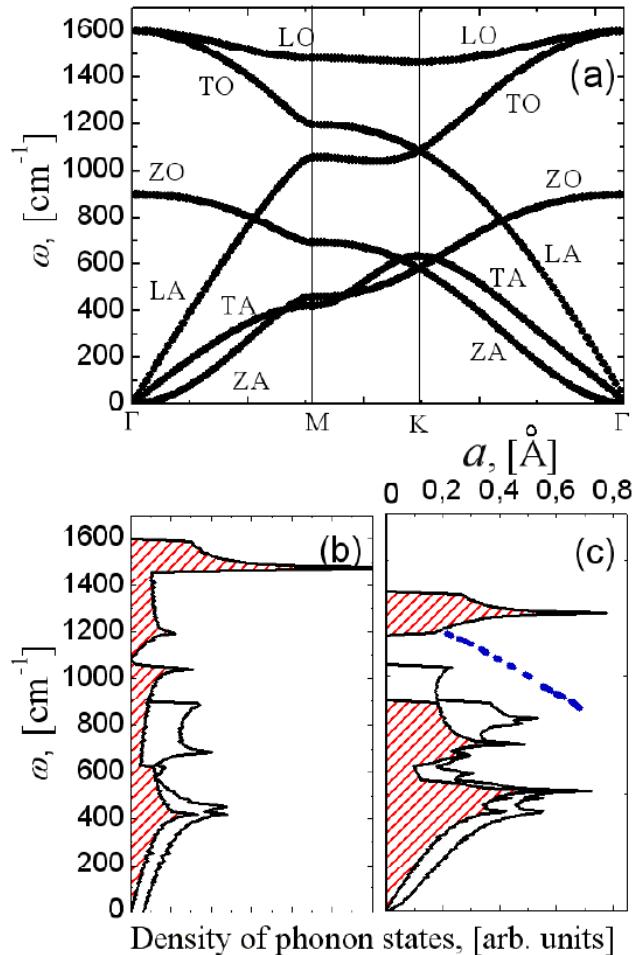
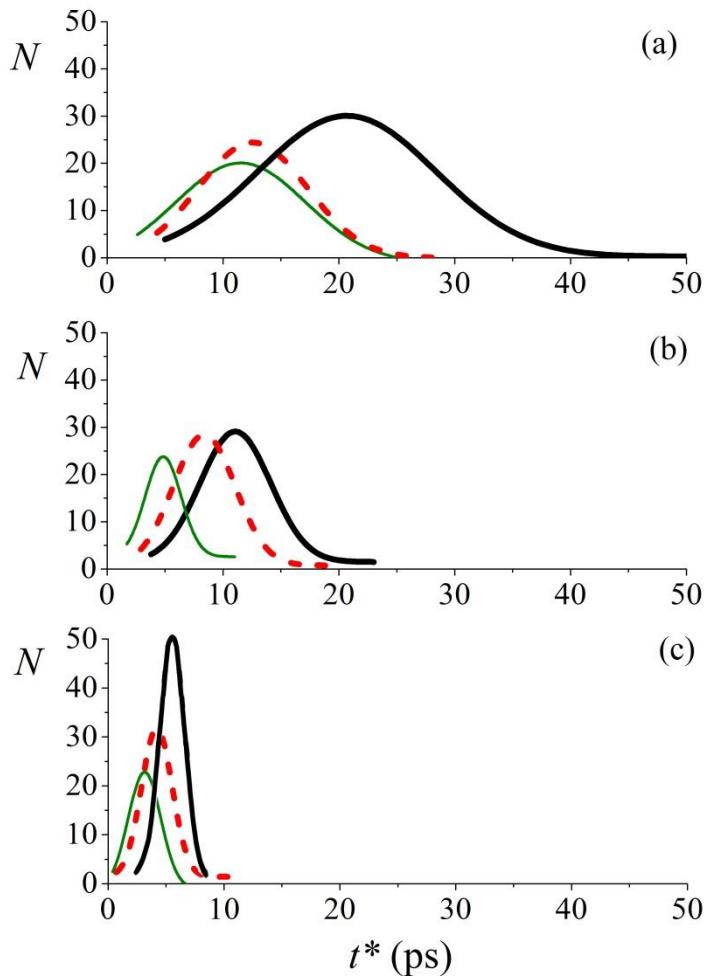
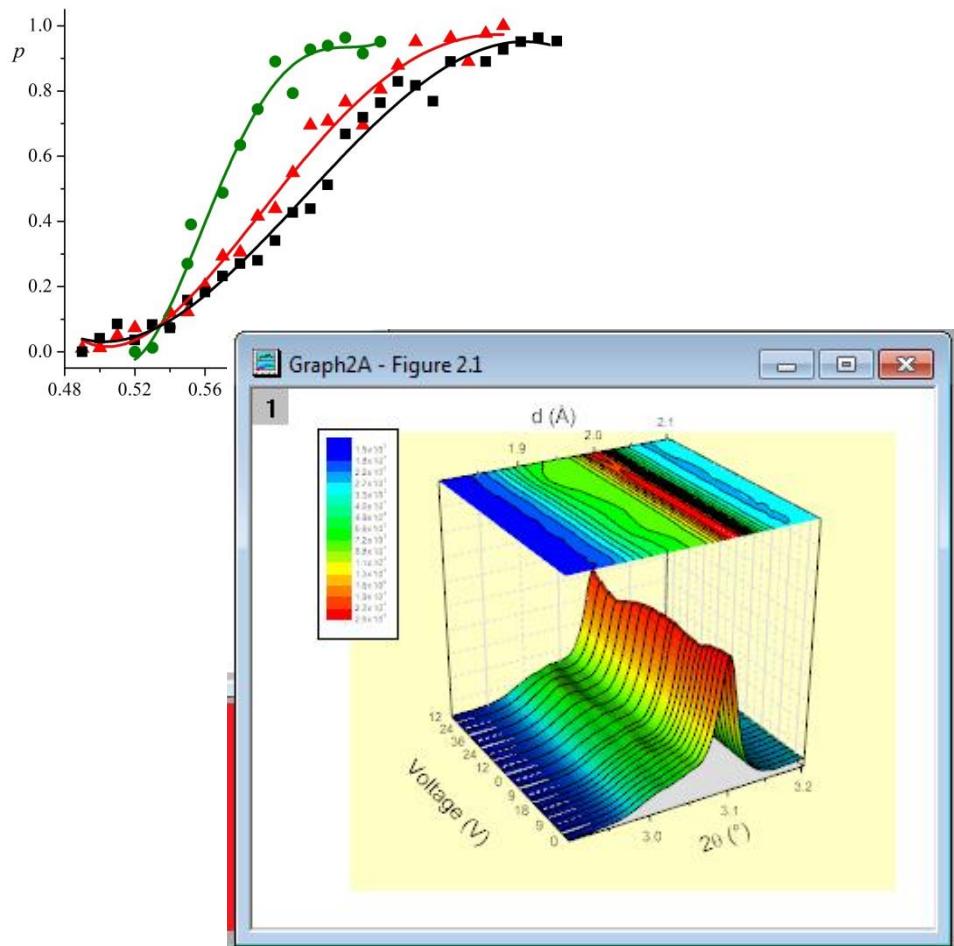


Fig. 1. (a) Graphene initial structure in two projections. Hydrogen atoms are shown by dark color and carbon atoms by light color. (b) Stroboscopic picture for DB with the initial amplitude A_0 . (c) Phonon density of states for different values of temperature.

drogenation because one of the main hypothesis is the participation of DBs in dehydrogenation. Experimental results considerably dependent on the initial structure and method of the investigation.

Построение графиков:

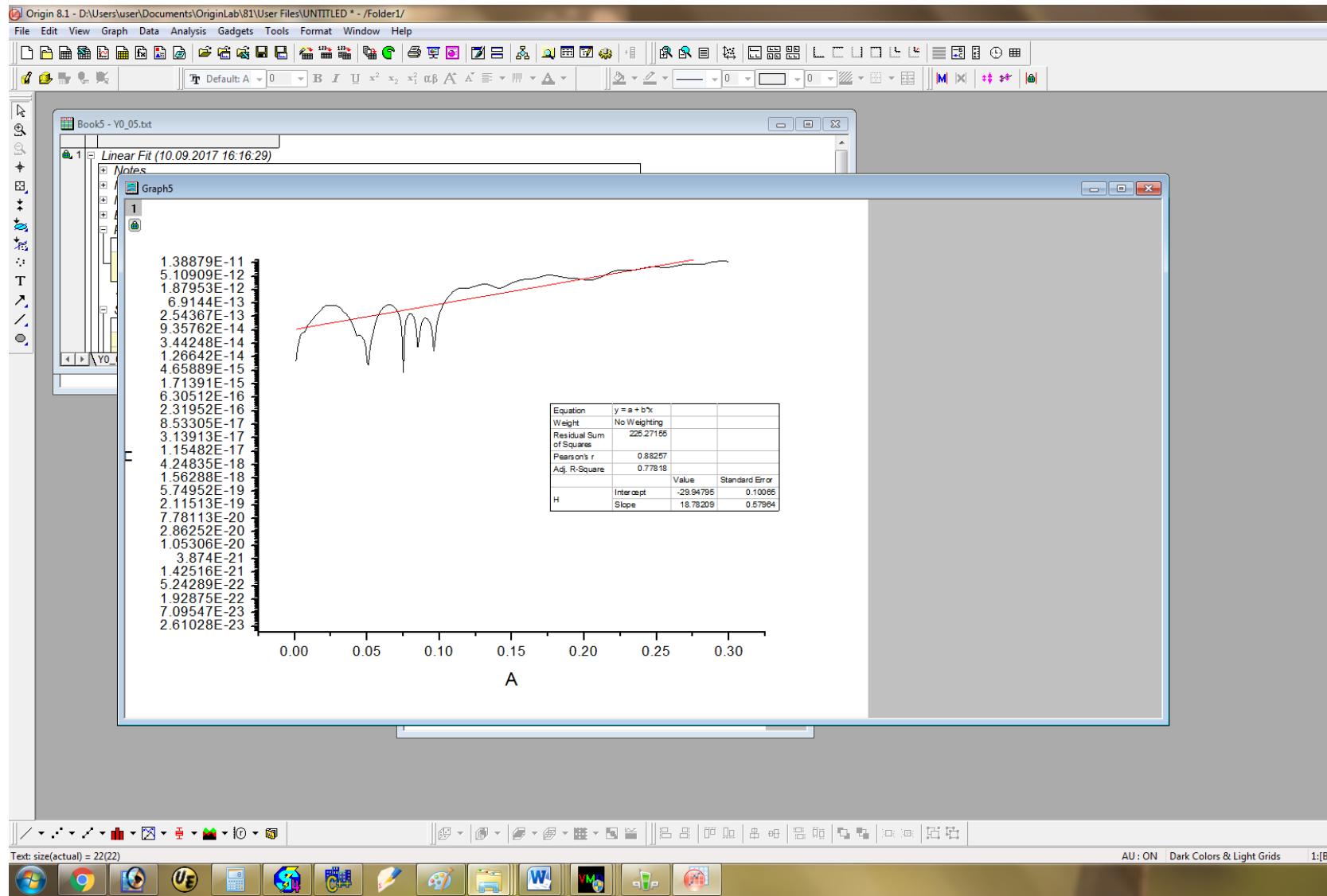
Origin — пакет программ фирмы OriginLab Corporation для численного анализа данных и научной графики, работающий на [компьютере](#) под управлением операционной системы [Microsoft Windows](#).



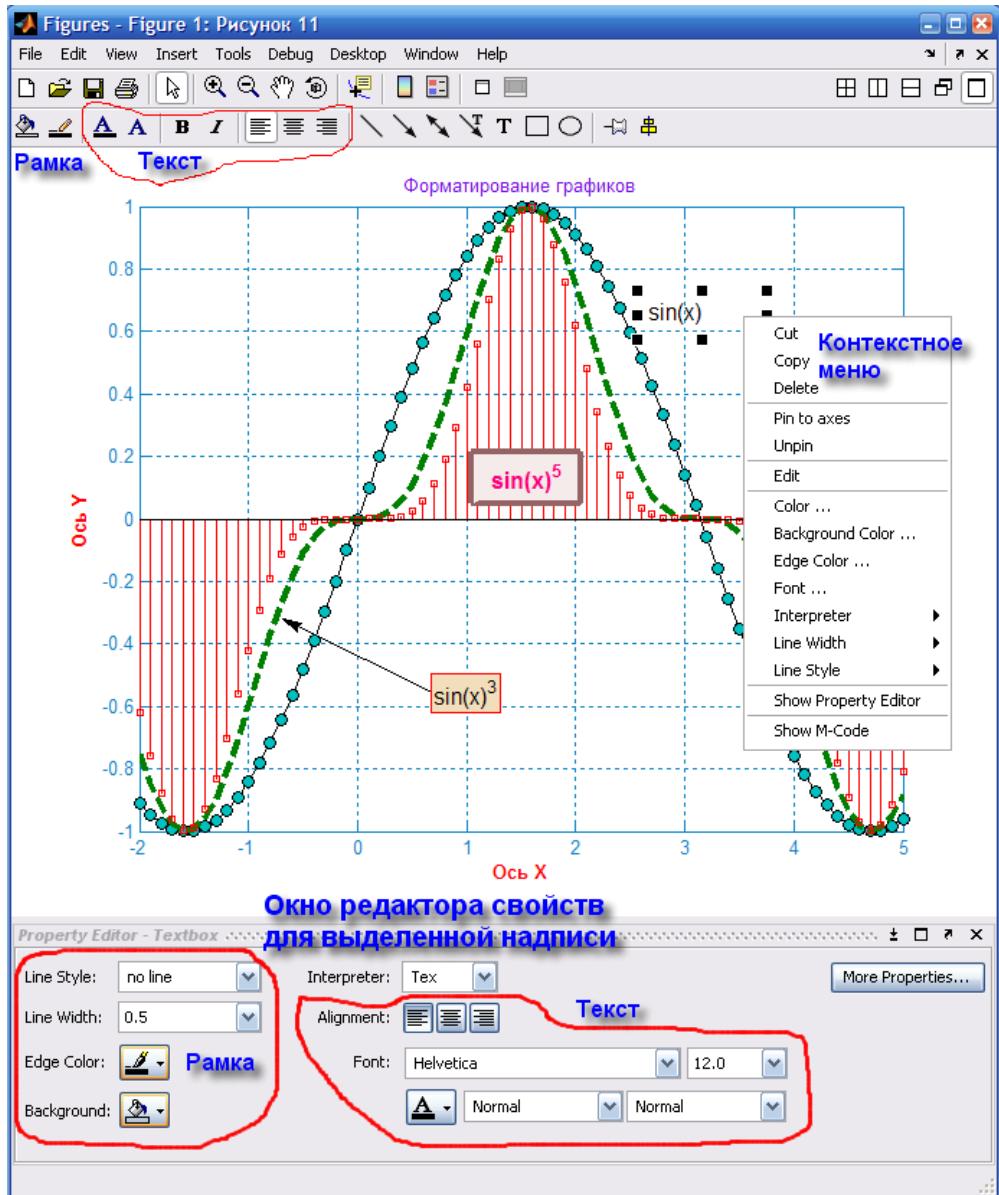
Построение графиков:



ORIGIN® 9.1
Data Analysis and Graphing Software



Построение графиков:



MATLAB (сокращение от англ. «Matrix Laboratory») — пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений и одноимённый язык программирования, используемый в этом пакете. Пакет используют более миллиона инженерных и научных работников, он работает на большинстве современных операционных систем, включая Linux, Mac OS, Solaris и Windows[4].

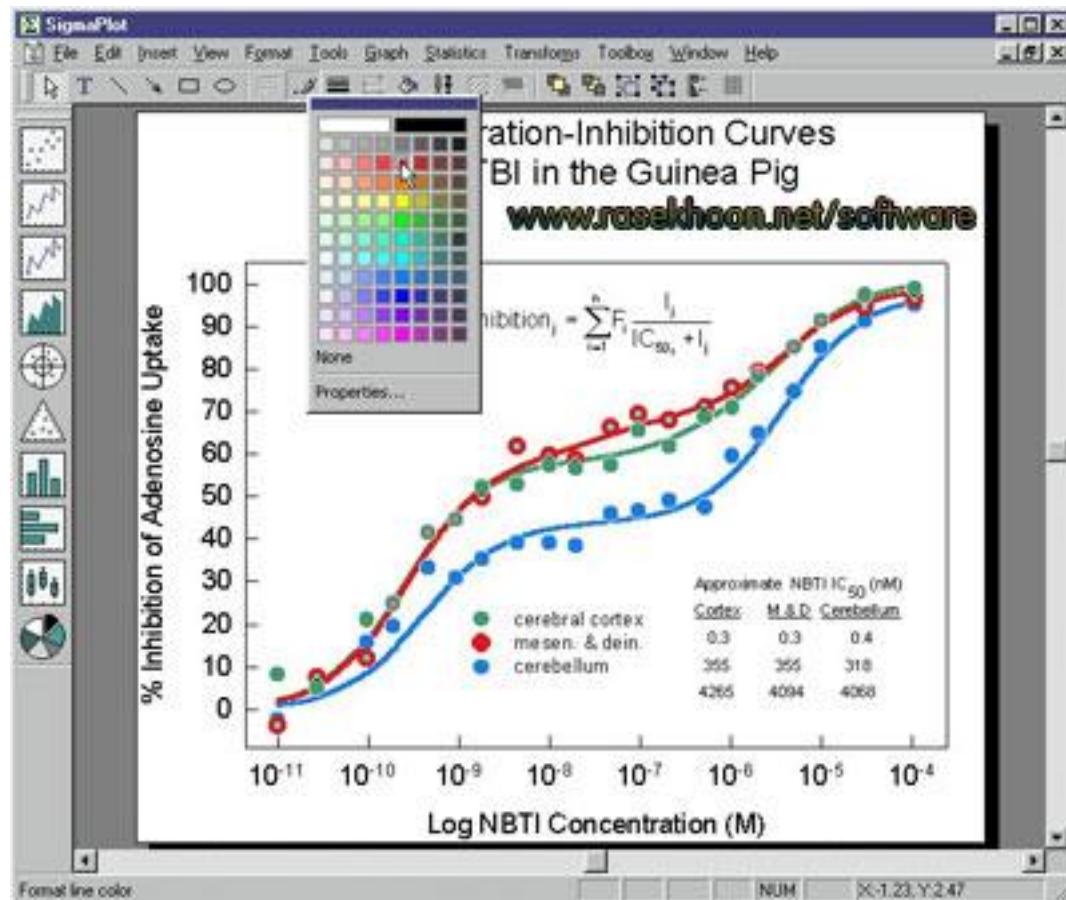
<http://elprivod.nmu.org.ua/files/mathapps/Дъяконов matlab по лный%20самоучитель.pdf>

Построение графиков:

SigmaPlot — программа для анализа и визуализации научных и статистических данных.

Для анализа математических и статистических данных в программе предусмотрены:

- Ввод табличных данных
 - Математическая обработка табличных данных
 - Широкий выбор (более 100) графиков и диаграмм
 - Широкий выбор способа оформления графиков и диаграмм
 - Регрессионный анализ с широким выбором вида уравнений
 - Редактирование графиков
- Поддержка OLE



Построение графиков:

MuPAD - математический софт Открытая система компьютерной алгебры, проводящая символьные и численные преобразования.

LiveMath - математический софт «Живая» система компьютерной алгебры и графики.

MathSoft - разработка математического программного обеспечения Программный продукт Mathcad.

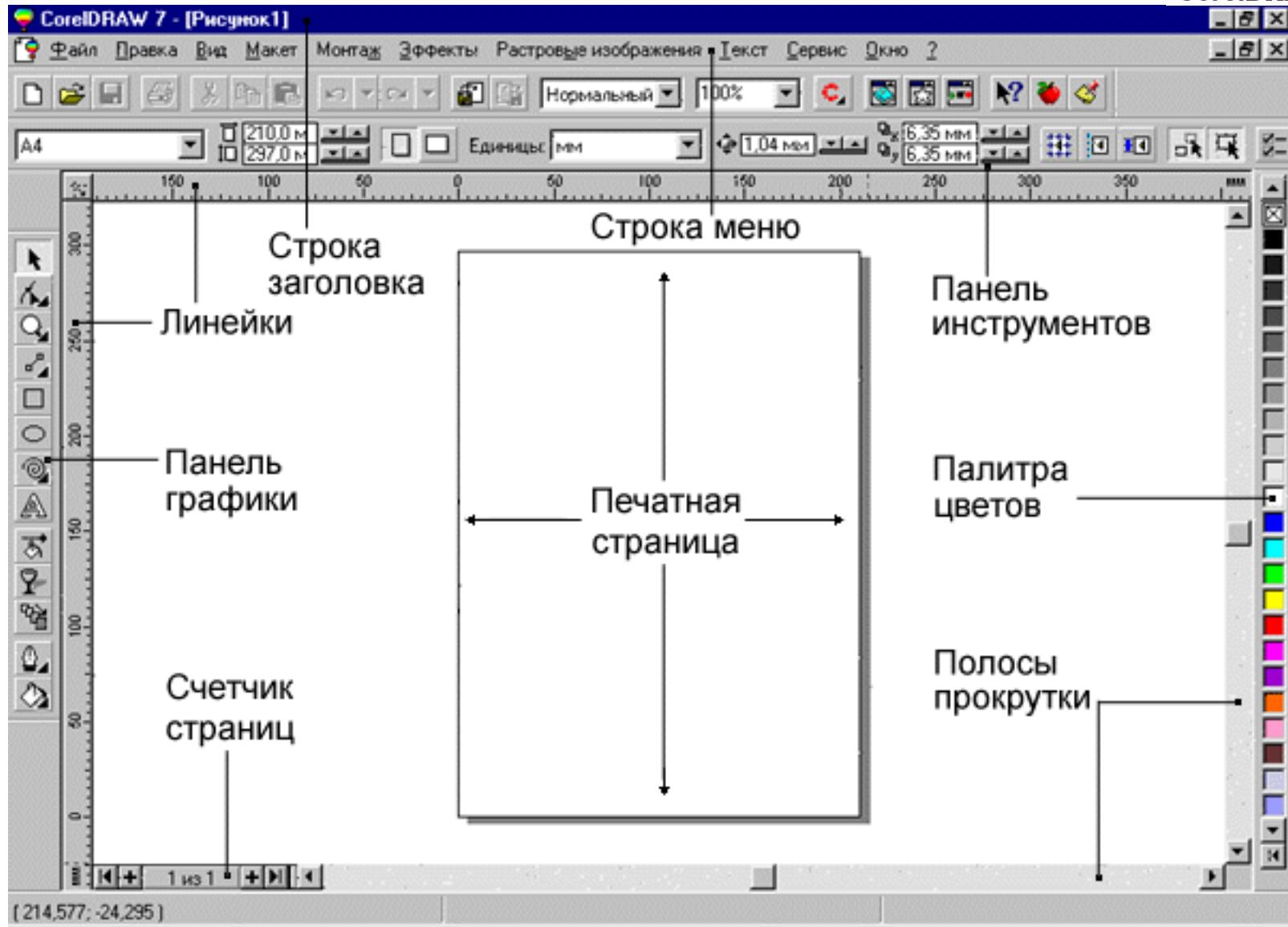
Mathematica — [система компьютерной алгебры](#) (обычно называется Математика, программный пакет Математика), широко используемая в научных, инженерных, математических и компьютерных областях.

Maple — программный пакет, [система компьютерной алгебры](#) (точнее, система компьютерной математики).

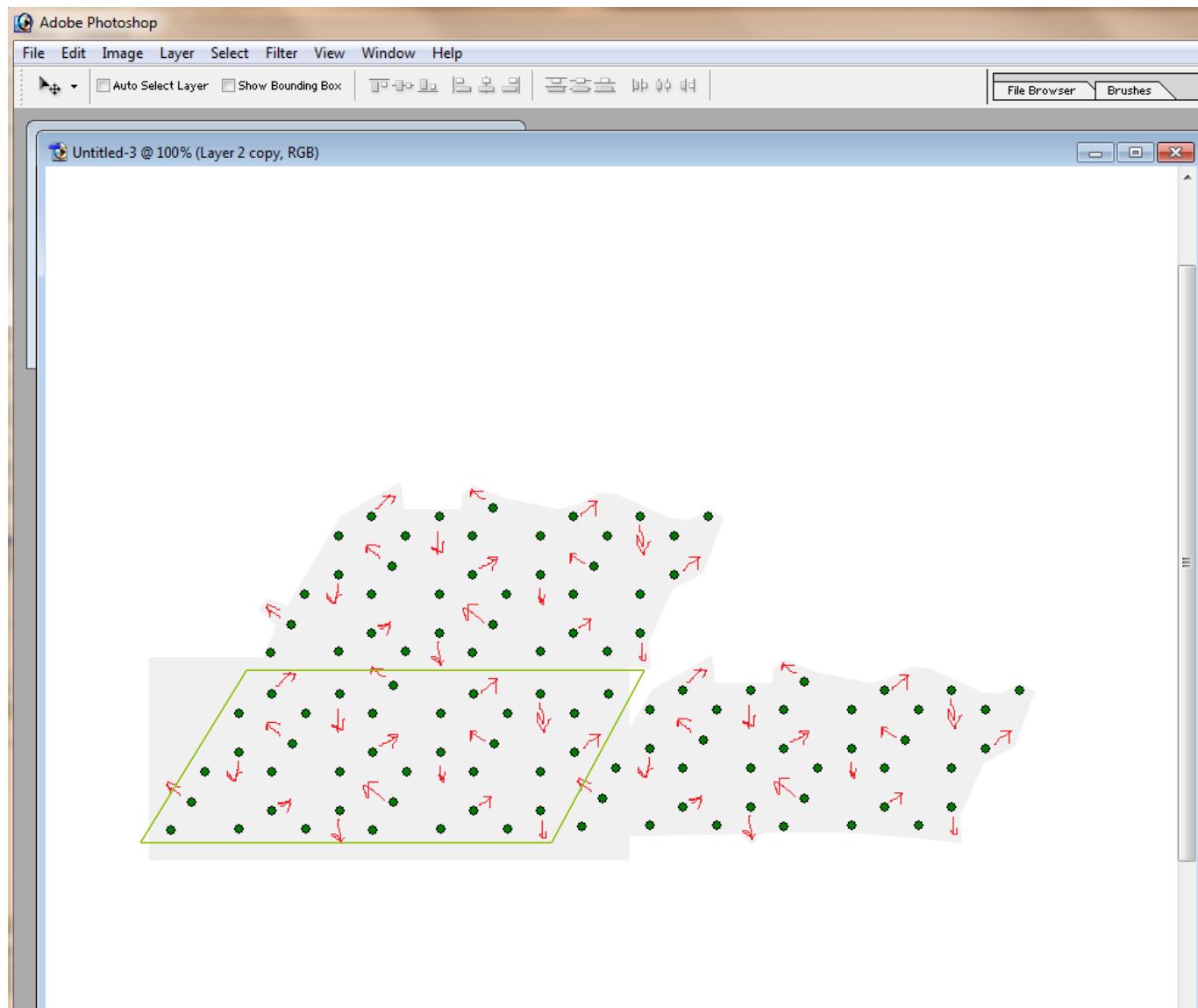
Система компьютерной алгебры (СКА, англ. computer algebra system, CAS) — это [прикладная программа](#) для [символьных вычислений](#), то есть выполнения преобразований и работы с математическими выражениями в аналитической (символьной) форме.



CorelDRAW



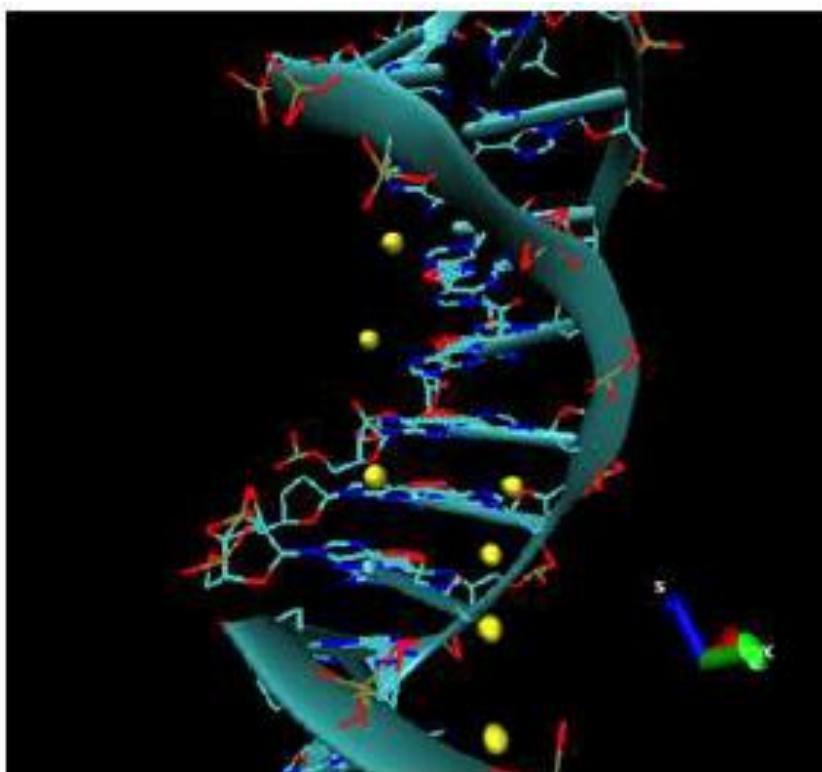
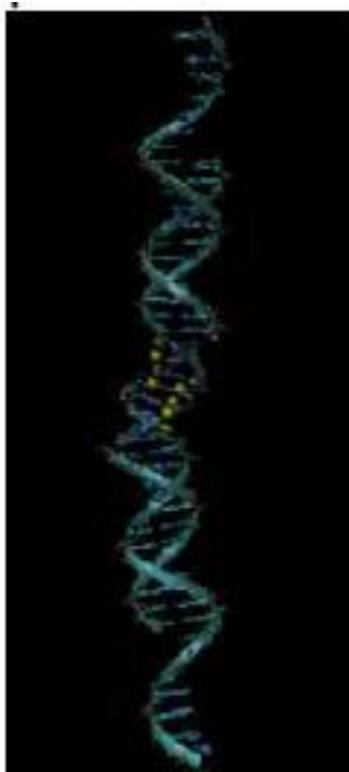
Построение графиков:



Анализ и оформление результатов



VMD [1] is a molecular graphics program designed for the interactive visualization and analysis of biopolymers such as proteins, nucleic acids, lipids, and membranes. VMD runs on all major Unix workstations, Apple MacOS X, and Microsoft Windows. Online information about VMD is available from:
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>



Визуализаторы молекул

Интерпретатор ChemCraft (<http://www.chemcraftprog.com/>) сочетает в себе как классические графические инструменты для подготовки исходной структуры, так и широкие возможности визуализации результатов расчетов

ViewMol3D (<http://redandr.tripod.com/vm3/>) – это Windows-ориентированная свободно распространяемая программа, разработанная Андреем Рыжковым и Аркадием Антипиным для визуализации результатов квантово-химических расчетов

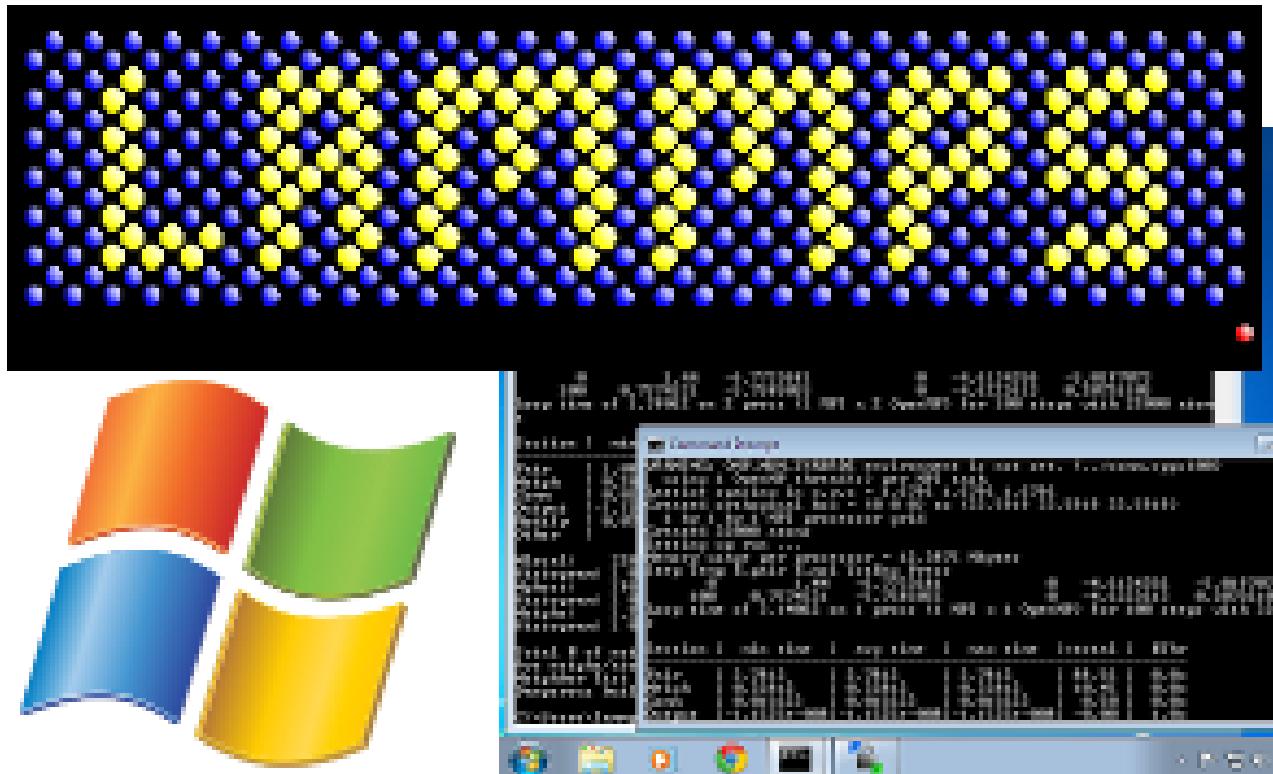
Данный визуализатор представлен свободно распространяемой Linux-версией (впрочем, есть возможность запустить его в среде Windows посредством эмулятора). Загрузить Molden можно с сайта <http://www.cmbi.ru.nl/molden/molden.html>

GaussView (<http://www.gaussian.com/>) является стандартным средством интерпретации результатов квантово-химических расчетов, выполненных в программах семейства Gaussian.

Молекулярная динамика

LAMMPS ([англ.](#) *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*)

— [свободный](#) пакет для классической молекулярной динамики, написанный группой из Сандийских национальных лабораторий. Пакет может применяться для крупных расчётов (до десятков миллионов атомов). Для работы на [многопроцессорных системах](#) используется интерфейс [MPI](#).



Первопринципное моделирование

Siesta (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) is an original method and a software implementation for performing [electronic structure](#) calculations and [ab initio molecular dynamics](#) simulations of [molecules](#) and solids. It uses a [density functional theory](#) code that predicts the physical properties of a collection of [atoms](#).



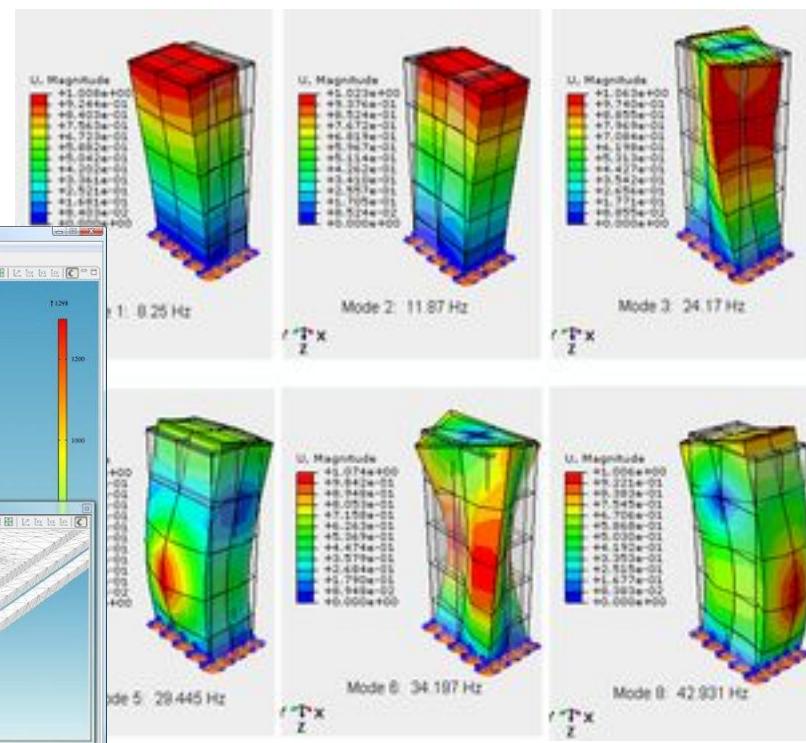
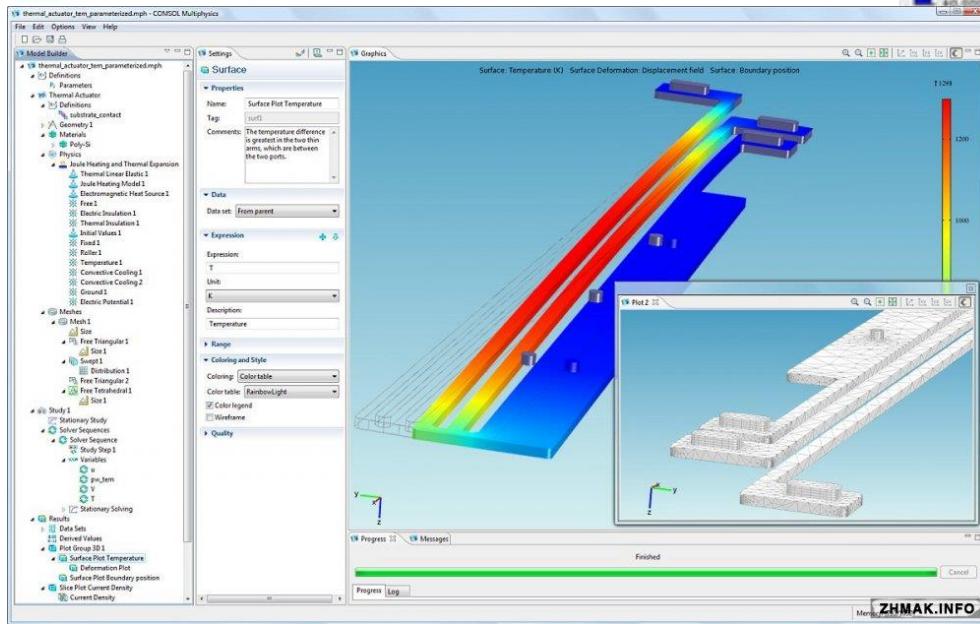
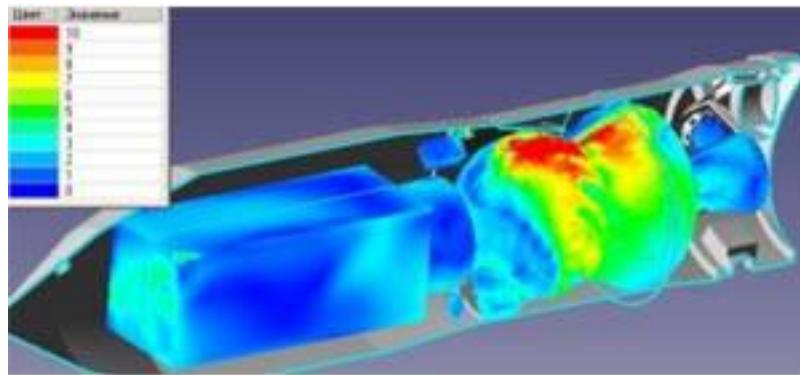
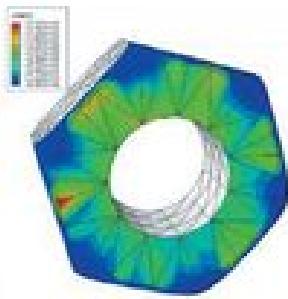
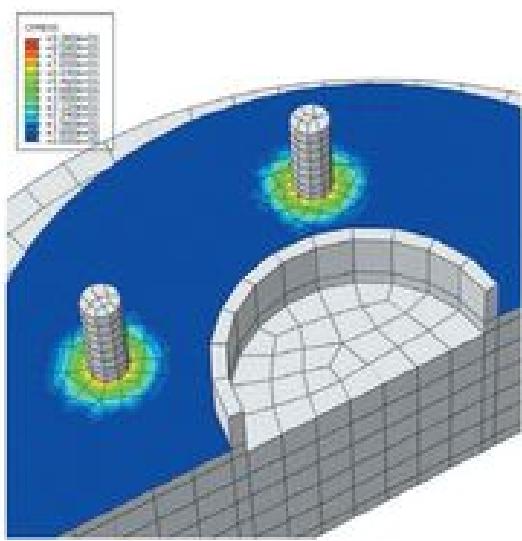
[\[About\]](#) [\[Access to the code\]](#) [\[Documentation\]](#) [\[Pseudopotentials\]](#) [\[The Team\]](#)

News

- [Announcement: Release of Siesta-4.0](#)
 - [Announcement: Siesta to be released with GPL license](#)
-

Siesta is both a method and its computer program implementation, to perform efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids. Siesta's efficiency stems from the use of strictly localized basis sets and from the implementation of linear-scaling algorithms which can be applied to suitable systems. A very important feature of the code is that its accuracy and cost can be tuned in a wide range, from quick exploratory calculations to highly accurate simulations matching the quality of other approaches, such as plane-wave and all-electron methods.

Континуальное моделирование



Языки программирования

Научное программирование — высокоориентированный стиль программирования для научных расчетов. От других видов программирования его отличают предельные корректность и стабильность конечного продукта, строгое разделение научной и интерфейсной частей, индивидуальность алгоритмов, а также преобладание эффективности над универсальностью.

Ученые используют различные языки программирования, выбор которых зависит от типа задачи и предпочтений автора. Исторически первым высокоуровневым языком программирования является **Fortran**, на нем написано много отлаженных библиотек математической статистики и библиотек для решения дифференциальных уравнений, что актуально для экономики и биологии соответственно.

Более простым синтаксисом обладает **Python**, также подходящий для программирования математических вычислений. Язык Python привлекается для обработки данных в математике, физике, экономике, биологии, химии и умеет работать с некоторыми другими «научными» языками: Fortran, C++, C#.

The End