

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой

физической химии



О.А. Козадеров

20.05.2022

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.О.07 Компьютерные технологии в науке и образовании**

1. Шифр и наименование направления подготовки: **04.04.01** Химия
2. Профиль подготовки/специализации: Физическая химия, Органическая химия, Аналитическая химия
3. Квалификация (степень) выпускника: магистр
4. Форма образования: очная
5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: физической химии
6. Составители программы: Протасова Ирина Валентиновна, к.х.н., доцент
7. Рекомендована: НМС химического факультета 19.04.2022, протокол №3
8. Учебный год: 2024/ 2025                      Семестры: 3

## 9. Цели и задачи изучения дисциплины:

Целью освоения учебной дисциплины «Компьютерные технологии в науке и образовании» является формирование у магистров полной системы представлений о роли информационных процессов в формировании современной научной картины мира, роли информационных технологий и вычислительной техники в развитии современного общества; обеспечить формирование у студентов прочных навыков рационального использования компьютеров в своей исследовательской, учебной и профессиональной деятельности.

Задача освоения учебной дисциплины состоит в том, что магистры должны учиться применению методов математического моделирования в химических исследованиях, построения эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных, имитационного моделирования при решении проблем химической технологии и экологии, использования компьютерных банков химических данных в обучении и научной работе; осваивают средства телекоммуникационного доступа к источникам научной информации, используют возможности сети Интернет для организации оперативного обмена информацией между исследовательскими группами, получения доступа к электронным журналам и конференциям.

## 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Учебная дисциплина дисциплины «Компьютерные технологии в науке и образовании» является дисциплиной обязательной части блока Б1 в структуре образовательной программы Магистратуры 04.04.01 Химия и изучается в 3 семестре.

Освоение дисциплины «Компьютерные технологии в науке и образовании» является необходимой основой для последующего изучения дисциплин вариативной части профессионального цикла, прохождения производственной практики и выполнения научно-исследовательской работы..

## 11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1	Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	Знать: Современные официальные и профессиональные информационные источники, используемые в профессиональной деятельности и при подготовке специалистов химического профиля.  Уметь: получать и анализировать химическую информацию  Владеть: IT технологиями сбора

			и анализа химической информации
		ОПК-3.2	Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-3.3	Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием
			Знать: специализированное программное обеспечение Уметь: применять стандартное и оригинальное программное обеспечение для решения задач профессиональной деятельности Владеть: приемами работы со стандартными и оригинальными программными продуктами
			Знать: современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента Уметь: решать задачи моделирования химических задач с помощью компьютерных технологий. Владеть: методами моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом – 3 / 108**

**13. Виды учебной работы:**

Вид учебной работы		Трудоемкость (часы)	
		Всего	По семестрам
			2
Аудиторные занятия		56	56
в том числе	практические занятия	18	18
	лабораторные	38	38
Самостоятельная работа		52	52
Форма промежуточной аттестации			
Зачет с оценкой			х
Итого:		108	108
Форма текущей аттестации			Контрольная работа (2)

### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
<b>Практические занятия</b>			
1.1	Современные тенденции развития компьютерных технологий.	Анализ современных тенденций развития информационных технологий. Новые достижения в создании вычислительных устройств, сетевых технологий, программного обеспечения.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
1.2	Современные тенденции развития компьютерных технологий	Роль информационных технологий в социальной сфере, науке и промышленности; Технопарки.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
1.3	Современные тенденции развития компьютерных технологий	Химическая информация в сети Интернет. Хемоинформатика	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
1.4	Электронные образовательные ресурсы	Электронные образовательные ресурсы и электронные учебно-образовательные системы. Цифровое образовательное пространство. Массовые открытые онлайн курсы.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
1.5	Электронные образовательные ресурсы	Электронная образовательная среда Moodle как средство организации дистанционного и смешанного обучения.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
1.6	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Электронные базы и банки данных химической информации в научных исследованиях. Классификация, основные методы создания, функционирования, доступа к базам и банкам данных и знаний химической информации. Электронные журналы и конференции.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
1.7	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Удаленные базы и банки данных и знаний химической информации, использование для оценки и прогнозирования свойств и процессов. Химические экспертные системы	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>

1.8	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Построение эмпирических моделей, имитационное моделирование при решении проблем химии, химической технологии и экологии. Использование специализированных пакетов прикладных программ для анализа результатов научного исследования.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
1.9	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Построение эмпирических моделей, имитационное моделирование при решении проблем химии, химической технологии и экологии. Использование специализированных пакетов прикладных программ для анализа результатов научного исследования.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
<b>Лабораторные работы</b>			
2.1	Электронные образовательные ресурсы.	Разработка электронных учебно-методических комплексов и обучение в системе Moodle. Интерфейс.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.2	Электронные образовательные ресурсы.	Ресурсы электронного курса в системе Moodle. Создание, добавление, редактирование страницы, книги, папки, пояснения и др. Работа с текстом в системе. Гиперссылки и видеоресурсы в курсе.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.3	Электронные образовательные ресурсы.	Элементы электронного курса в системе Moodle. Создание, добавление, редактирование семинара, задания, опроса и др.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.4	Электронные образовательные ресурсы.	Элементы электронного курса в системе Moodle. Создание, добавление, редактирование семинара, задания, опроса и др.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.5	Электронные образовательные ресурсы.	Деятельностные элементы курса. Создание, добавление, редактирование чата, форума, посещаемости, глоссария, базы данных, галереи.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>

			<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">ew.php?id=1514</a>
2.6	Электронные образовательные ресурсы.	Методы контроля знаний обучающихся средствами электронной образовательной среды Moodle. Создание, добавление, редактирование элемента курса "Задание". Использование форума для проверки и взаимопроверки знаний обучающихся	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.7	Электронные образовательные ресурсы.	Методы контроля знаний, обучающихся средствами электронной образовательной среды Moodle.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.8	Электронные образовательные ресурсы.	Настройка и наполнение банка вопросов вопросами разного типа. Создание, добавление, редактирование элемента курса "Тест". Настройка тестового сценария. Статистика тестов. Определение характеристик качества тестов	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.9	Электронные образовательные ресурсы.	Оценивание учебных результатов. Журнал оценок.	ЭУМК «Компьютерные технологии в образовании» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a>
2.10	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Электронные базы и банки данных химии 2.12ой информации. Использование компьютерных банков химических данных в обучении и научной работе.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.11	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов численного решения нелинейных уравнений и систем уравнений для решения химических задач.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.12	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических	Применение методов численного интегрирования для решения химических задач.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>

	исследований.		
2.13	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов численного дифференцирования в решении химических задач	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.14	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Регрессионный анализ. Статистическая обработка данных химического исследования с использованием пакетов программ статистической обработки данных.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.15	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Двумерная и трехмерная интерполяция при обработке результатов химических исследований.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.16	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Способы и средства визуализации результатов научных экспериментов.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.17	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Построение эмпирических моделей с использованием пакетов программ, имитационное моделирование при решении проблем химии, химической технологии и экологии. Планирование многофакторного эксперимента.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>
2.18	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Построение эмпирических моделей с использованием пакетов программ, имитационное моделирование при решении проблем химии, химической технологии и экологии.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>

		Планирование многофакторного эксперимента.	
2.19	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Построение эмпирических моделей с использованием пакетов программ, имитационное моделирование при решении проблем химии, химической технологии и экологии. Планирование многофакторного эксперимента.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640</a>

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)			
		Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Современные тенденции развития компьютерных технологий.	6	0	16	22
2	Электронные образовательные ресурсы	4	18	22	44
5	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	6	16	20	42
	Итого:	18	38	52	108

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «MOOC ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети для организации лекционных, лабораторных занятий и самостоятельной работы студентов.

Овладение знаниями по дисциплине предполагает посещение практических и лабораторных занятий, проводимых под руководством преподавателя, а также активную самостоятельную работу.

Формы работы студентов при изучении дисциплины отражены в методических материалах к каждой теме занятия.

При изучении дисциплины используются следующие виды и формы аудиторной работы студентов:

- посещение практических и лабораторных занятий;
- выполнение практических заданий;



- изучение учебной, научной и методической литературы с использованием ресурсов библиотеки ВГУ, материалов, размещенных в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» и электронных библиотечных систем;
- тестирование;
- формирование и выполнение творческого задания.

Контроль результатов самостоятельной работы студентов, которую они выполняют на лабораторных занятиях осуществляется в пределах времени, отведенного на занятие по дисциплине.

Формы контроля при изучении дисциплины:

- индивидуальное практическое задание;
- тестирование.

При изучении дисциплины используются следующие виды и формы внеаудиторной работы студентов:

- изучение учебной, научной и методической литературы с использованием ресурсов библиотеки ВГУ, материалов, размещенных в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» и электронных библиотечных систем;
- выполнение индивидуальных практических заданий по темам;
- самотестирование в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ»

Контроль результатов внеаудиторной самостоятельной работы преподаватель осуществляет в электронном курсе на курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» на каждом лабораторном занятии в пределах времени, отведенного на занятие по дисциплине.

В ходе подготовки к лабораторным занятиям, текущим и промежуточным аттестациям студенту рекомендуется активно использовать электронный курс "Компьютерные технологии в науке и образовании", размещенный на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ", где размещен дополнительный теоретический материал по теме занятия, практические задания по дисциплине и перечень вопросов для подготовки к текущим и промежуточным аттестациям, тесты для самопроверки. Также студенту рекомендуется использовать весь набор методов и средств современных информационных технологий для изучения отечественной и зарубежной литературы по дисциплине, оценки и анализа ее текущего состояния и перспектив развития.

Студенту предоставляется возможность работать в компьютерном классе химического факультета (271 аудитория), предоставляется доступ к Интернет-ресурсам и электронной почте, программному обеспечению компьютерного класса факультета, ресурсам Зональной научной библиотеки ВГУ, в том числе электронно-библиотечным системам.

## 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Коноплева И.А. Информационные технологии / И.А. Коноплева ; Хохлова О. А., Денисов А. В. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Проспект, 2014 .— 328 с. — <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=251652">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=251652</a> >
2.	Красильникова В.А. Информационные и коммуникационные технологии в образовании / В.А. Красильникова .— Москва : Директ-Медиа, 2013 .— 231 с. — <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=209292">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=209292</a> >
3.	Миркин Б. Г. Введение в анализ данных : учебник и практикум / Б. Г. Миркин. — М. : Издательство Юрайт, 2016. — 174 с. // Издательство «Юрайт» : электронно-библиотечная система. – URL : <a href="http://www.biblio-online.ru">http://www.biblio-online.ru</a>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Киселев, Г.М. Информационные технологии в педагогическом образовании / Г.М. Киселев ; Бочкова Р. В. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Дашков и Ко, 2021 .— 304 с. — (Учебные издания для бакалавров) .— <URL:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=253883>.
5.	Акатова, Н. А. Информационные технологии в офисной деятельности учеб. - метод. пособие / Н. А. Акатова, О. И. Варгасова. - Москва : МИСиС, 2020. - 236 с. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" - URL : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/Misis_455.html">https://www.studentlibrary.ru/book/Misis_455.html</a>
6.	Лемешко, Т.Б. Информационные технологии в образовании / Т.Б. Лемешко .— Москва : Издательство РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева, 2012 .— 132 с. — <URL:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=144926>
7.	Исакова, А.И. Информационные технологии / А.И. Исакова ; Исаков М. Н. — Томск : Эль Контент, 2012 .— 174 с. — ISBN 978-5-4332-0036-4 .— <URL:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208647>
8.	Боев, В.Д. Компьютерное моделирование / В.Д. Боев ; Сыпченко Р. П. — Москва : Интернет-Университет Информационных Технологий, 2010 .— 455 с. — <URL:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=233705>
9.	Протасова И. В. Численные методы. Применение в химии : учеб.-метод. пособие по курсу "Численные методы и программирование" по спец.: 020201 (011000) - Химия / И.В. Протасова, В.А. Крысанов .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 47 с.
10.	Компьютерные технологии в научном эксперименте. Обработка и анализ изображений химических объектов [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для магистрантов хим. фак. очно-заоч. и очной форм обучения, для направления 04.04.01 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост. И.В. Протасова .— Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2018 .— <URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-136.pdf>.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы Интернет):

№ п/п	Источник
11.	Информационная система "Университетская библиотека ONLINE" — < <a href="http://biblioclub.ru">http://biblioclub.ru</a> >
12.	Электронно-библиотечная система "Издательство "Лань" — < <a href="http://e.lanbook.com">http://e.lanbook.com</a> >
13.	Электронная библиотека Воронежского государственного университета. — < <a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a> >
14.	Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет. - < <a href="http://www.chemnet.ru">http://www.chemnet.ru</a> >
15.	Образовательный математический сайт Exponenta.ru. - < <a href="http://www.exponenta.ru">www.exponenta.ru</a> >
16.	Научная электронная библиотека. — < <a href="http://www.elibrary.ru">http://www.elibrary.ru</a> >
17.	Электронный университет ВГУ. Образовательный портал. — < <a href="http://www.moodle.vsu.ru">http://www.moodle.vsu.ru</a> >
18.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" . — < <a href="http://window.edu.ru">http://window.edu.ru</a> >
19.	Сайт химического факультет ВГУ. - <URL: <a href="http://www.chem.vsu.ru">http://www.chem.vsu.ru</a> >

## 16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1.	Компьютерные технологии в научном эксперименте. Обработка и анализ изображений химических объектов [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для магистрантов хим. фак. очно-заоч. и очной форм обучения, для направления 04.04.01 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост. И.В. Протасова .— Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2018 .— <URL: <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-136.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-136.pdf</a> >.
2	Практикум по информатике. Статистическая обработка химического эксперимента средствами электронных таблиц [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для студентов 1-го курса химического факультета, для направлений: 04.03.01 - Химия, 04.03.02 - Химия, физика и механика материалов (бакалавриат), 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (специалитет)] / Воронеж. гос. ун-т ; сост. И.В. Протасова ; сост. И.В. Нечаев .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2017 .— Загл. с титул. экрана .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .— Windows 2000; Adobe Acrobat Reader .— <URL: <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf</a> >.
3	Протасова И. В. Численные методы. Применение в химии : учеб.-метод. пособие по курсу "Численные методы и программирование" по специальностям: 020201 (011000) - Химия / И.В. Протасова, В.А. Крысанов .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 47 с.
4	Протасова И.В. Информационные технологии в науке и образовании : Электронный курс/ И.В. Протасова. - < <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514</a> >

## 17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров

При реализации дисциплины используются технологии:

1. Организация взаимодействия со студентами посредством мессенжера в ЭУМК, электронной почты - [protasova@chem.vsu.ru](mailto:protasova@chem.vsu.ru), через сайт факультета - <http://www.chem.vsu.ru>

2. Использование электронных библиотечных систем для организации самостоятельной работы: ЭБС «Консультант студента». <URL: <http://www.studentlibrary.ru/>>, ЭБС «Университетская библиотека онлайн». <URL:<http://biblioclub.ru/>>, ЭБС «Лань». <URL:<http://www.e.lanbook.com/>>, ЭБС IPRbooks. <URL:<http://www.iprbookshop.ru/>>, Образовательный портал «Электронный университет ВГУ», Сайт химического факультет ВГУ. - <URL: <http://www.chem.vsu.ru>>, Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет. <<http://www.chemnet.ru>>, Образовательный

математический сайт Exponenta.ru. <[www.exponenta.ru](http://www.exponenta.ru)>, Научная электронная библиотека. — <<http://www.elibrary.ru>>, Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам". — <<http://window.edu.ru>>

3. Программное обеспечение – WinSrvStd 2012 RUS OLP NL Acdmc 2Proc, Антивирус Касперского, Антивирус Dr. Web, MS Office 2003 Std Win32 RUS OLP NL AE, Gaussian09, Microsoft Windows 7, Программная система для обнаружения текстовых заимствований в учебных и научных работах «Антиплагиат.ВУЗ», СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС "Консультант Плюс" для образования, LibreOffice, Mozilla Firefox, сервисы Яндекс

### **18. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

1. Аудиторный фонд корпуса №1 по ул. Университетская пл.1 - 271 аудитория, Интернет-центр ВГУ

2 Мебель и оборудование учебных аудиторий - столы, стулья, мультимедийная переносная система, электронно-вычислительная техника.

3. Компьютерный класс на 12 посадочных мест, оборудованных персональными компьютерами на базе процессоров Intel, объединенных в локальную вычислительную сеть, подключенную к сети Воронежского государственного университета, имеющие выход в Интернет.

4. Предусмотрена возможность обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья с применением специального оборудования: колонки, мультимедийный проектор, операционные системы с режимом настройки специальных возможностей (оптимизация изображения на экране, подключение режима чтения с экрана, голосового ввода и др.), мобильные компьютеры – ноутбуки.

### **19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций**

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Современные тенденции развития компьютерных технологий.	ОПК-3	ОПК-3.1	Индивидуальное практическое задание
2.	Электронные образовательные ресурсы	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2	Индивидуальное практическое задание
3	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Индивидуальное практическое задание

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
Промежуточная аттестация форма контроля - зачет с оценкой				Перечень вопросов  Практическое задание
При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценка за зачет может быть выставлена по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.				

## 20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

### 20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: Индивидуальных творческих проектов и контрольного расчетного задания

#### 20.1.1. Темы индивидуальных творческих проектов для текущей аттестации

##### Индивидуальные творческие задания (проекты):

Индивидуальный творческий проект выполняется в Электронной образовательной среде Moodle на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ"

Индивидуальный проект представляет собой законченный интерактивный электронный ресурс по теме, предложенной преподавателем или выбранной индивидуально.

Для отчета работы над курсом написать аннотацию к курсу, содержащую информацию об авторе курса, назначении курса, структуре курса и формах представления элементов курса.

*Проект должен содержать следующие элементы и ресурсы:*

- Название раздела и логотип
- Книгу, содержащую не менее 3 глав
- Страницу "Полезные ресурсы по теме" с гиперссылками на тематические ресурсы или литературу по разделу
- Видеоролик по теме раздела (встроенный или гиперссылку на него)
- Иллюстрацию или галерею иллюстраций по теме раздела
- Словарь терминов по теме раздела, содержащий не менее 10 записей
- Игровой элемент на основе словаря
- Файл или папку с файлами по теме раздела
- Банк вопросов, содержащий не менее 30 вопросов разных типов (3 категории по 10 вопросов)
- Тестовый опрос по теме раздела

### **Темы индивидуальных проектов.**

1. Современные тенденции развития Информационных технологий. Развитие аппаратного обеспечения
2. Современные тенденции развития Информационных технологий. Развитие программного обеспечения
3. Тенденции развития компьютерных сетей. Архитектура, протоколы представления ресурсов сети и передачи информации в сети.
4. Облачные технологии. Виртуализация информационных ресурсов
5. Средства общения в сети Интернет
6. Big Data. Проблемы и перспективы
7. Квантовые компьютеры
8. Нанотехнологии в Информационных технологиях.
9. Кремниевая долина
10. Технопарки в России
11. Информационные преступления. Защита информации в сети Интернет
12. Wiki - ресурсы в сети Интернет
13. Сеть Web 2.0. Социальные сети
14. Web-Userbility. Компьютер для людей с ограниченными возможностями
15. Искусственный интеллект. Интеллектуальные роботы
16. Умный дом
17. Электронный нос. Электронный язык
18. Компьютерное зрение
19. Электронные архивы, библиотеки, экспертные системы
20. Химическая информация в сети Интернет
21. Хемоинформатика
22. Компьютерные игры. Игровая зависимость
23. Индустрия компьютерных игр и образование

### **Критерии оценки задания:**

- оценка «отлично» выставляется, если обучающийся создал электронный образовательный ресурс на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ". Выполненный ресурс содержит все указанные способы представления учебного материала его проверки, носит законченный характер и протестирован на студентах подгруппы. При выполнении задания обучающийся демонстрирует знание современных компьютерные технологии, используемые в образовании; умение: решать задачи поиска, хранения, обработки, представления научной информации с использованием компьютерных технологий; умение создавать электронные образовательные ресурсы.

- оценка «хорошо» выставляется, если обучающийся создал электронный образовательный ресурс на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ". Выполненный ресурс носит законченный характер и протестирован на студентах подгруппы, однако при его создании обучающийся не демонстрирует владение всеми средствами электронной среды Moodle, несистематические знания современных компьютерных технологий;

- оценка «удовлетворительно» выставляется, если обучающийся создал электронный образовательный ресурс на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ", однако выполненный ресурс носит незаконченный характер или не протестирован на студентах подгруппы. При создании образовательного ресурса обучающийся демонстрирует

удовлетворительное владение средствами электронной среды Moodle. Студент демонстрирует фрагментарные знания современных компьютерных технологий.

- оценка «неудовлетворительно» выставляется, если обучающийся не создал электронный образовательный ресурс на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ" или выполненный ресурс носит незаконченный характер

## 20.1. Перечень расчетных заданий

Выбор варианта задания осуществляется случайным образом средствами ЭОС Moodle.

### Задание 1.

Найти методом наименьших квадратов следующее:

1. Вид приближающих функций:

- Линейной;
- Квадратичной;
- Показательной;
- Степенной;
- Логарифмической
- Экспоненциальной.

2. Сравнить качество полученных приближений путем сравнения их отклонений (коэффициентов корреляции). Сделать вывод.

3. Построить графики получившихся зависимостей и табличных значений.

4. Найти многочлен  $P_m(x)=a_0+a_1*x+a_2*x^2+\dots+a_m*x^m$  наилучшего среднеквадратичного приближения оптимальной степени  $m=m_0$ . За оптимальное значение принять ту степень многочлена, начиная с которой величина отклонения стабилизируется или начинает возрастать.

Набор экспериментальных значений:

<i>x</i>	1,20	1,57	1,94	2,31	2,68	3,05	3,42	3,79
<i>y</i>	2,59	2,06	1,58	1,25	0,91	0,66	0,38	0,21

### Вариант 2

Найти методом наименьших квадратов следующее:

1. Вид приближающих функций:

- Линейной;
- Квадратичной;
- Показательной;
- Степенной;
- Логарифмической
- Экспоненциальной.

2. Сравнить качество полученных приближений путем сравнения их отклонений (коэффициентов корреляции). Сделать вывод.

3. Построить графики получившихся зависимостей и табличных значений.

4. Найти многочлен  $P_m(x)=a_0+a_1*x+a_2*x^2+\dots+a_m*x^m$  наилучшего среднеквадратичного приближения оптимальной степени  $m=m_0$ . За оптимальное значение принять ту степень многочлена, начиная с которой величина отклонения стабилизируется или начинает возрастать.

Набор экспериментальных значений:

<i>x</i>	1,73	2,56	3,39	4,22	5,05	5,89	6,70	7,53
<i>y</i>	0,63	1,11	1,42	1,94	2,30	2,89	3,29	3,87

### Критерии оценки задания

<b>Отлично</b>	представлен рабочий проект, сделаны обоснованные выводы, продемонстрировано знание методов анализа результатов научного эксперимента, умение связывать теорию с практикой;
<b>Хорошо</b>	представлен рабочий проект, продемонстрировано знание методов анализа результатов научного эксперимента, умение связывать теорию с практикой; могут быть допущены ошибки, которые устраняются при ответе на дополнительные вопросы
<b>Удовлетворительно</b>	представлен рабочий проект, допущены ошибки, не приводящие к неверным выводам. продемонстрировано удовлетворительное знание методов анализа результатов научного эксперимента.
<b>Неудовлетворительно</b>	представлен нерабочий проект, допущены ошибки, приводящие к неверным выводам, продемонстрировано неудовлетворительно владение теоретическим материалом.

### 20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: индивидуальное практико-ориентированное задание

#### Перечень практико-ориентированных заданий для промежуточной аттестации

Выбор варианта задания осуществляется случайным образом средствами ЭОС Moodle.

#### Задание № 1

Изменение температур потоков  $t_1$  и  $t_2$  по длине аппарата / описываются уравнениями

$$\frac{dt_1}{dl} = -\frac{KF(t_1 - t_2)}{G_1 C_1 L};$$

$$\frac{dt_2}{dl} = \frac{KF(t_1 - t_2)}{G_2 C_2 L},$$

где  $G_1, G_2$  – расходы потоков, кг/с;  $C_1, C_2$  – удельные теплоемкости, Дж/(кг·К);  $L$  – общая длина аппарата, м;  $K$  – коэффициент теплопередачи, Вт/(м<sup>2</sup>·К);  $F$  – поверхность теплопередачи, м<sup>2</sup>.

Рассчитать профиль изменения температур по длине аппарата. Результат вывести в виде таблицы и графика.

Исходные данные для контрольного расчета

$K = 120$ ;  $F = 24$ ; температуры на входе в аппарат  $t_1 = 95$ ;  $t_2 = 15$  °С;

$G_1 = 2$ ;  $G_2 = 4$ ;  $C_1 = 4190$ ;  $C_2 = 3500$ ;  $L = 3$ .



## Задание № 2

Для воды зависимость динамической вязкости от температуры можно аппроксимировать функцией вида

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + at + bt^2},$$

где  $\mu_0$  – динамическая вязкость при 0 °С, Па·с.

Оценить коэффициенты  $a$  и  $b$  по экспериментальным значениям  $\mu(t)$

$t, ^\circ\text{C}$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
$\mu \cdot 10^6$	1790	1310	1000	804	657	549	470	406	355	315	282

Рассмотрите разные способы решения задачи: а) воспользуйтесь приведением исходного уравнения к виду линейной регрессии;

б) примените нелинейную регрессию общего вида

## Задание № 3

В таблице приведена зависимость давления насыщенного пара уксусной кислоты от температуры:

$t, ^\circ\text{C}$	0	10	20	30	40	50	60	80	90	100	110
$p, \text{кПа}$	4,7	8,4	15,7	26	46	75	117	269	391	554	777

Какое из приведенных соотношений

$$\ln p = \frac{A}{T} + B; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T;$$

$$\ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T + D_2 T^2.$$

наилучшим образом описывает экспериментальные данные?

## Задание № 4

Решить систему нелинейных алгебраических уравнений относительно конечных концентраций компонентов сложной химической реакции, протекающей в реакторе идеального смешения:

$$C_1^k - C_1^0 = \tau \cdot \left[ -2k_1 (C_1^k)^2 \right]$$

$$C_2^k - C_2^0 = \tau \cdot \left[ k_1 (C_1^k)^2 - k_2 C_2^k \right]$$

$$C_3^k - C_3^0 = \tau \cdot \left[ k_2 C_2^k - 2k_3 (C_3^k)^2 C_4^k + 2k_4 C_5^k \right]$$

$$C_4^k - C_4^0 = \tau \cdot \left[ -k_3 (C_3^k)^2 C_4^k + k_4 C_5^k \right]$$

$$C_5^k - C_5^0 = -(C_4^k - C_4^0)$$

Исходные данные для расчета:  $\tau = 6$ ;  $C^0 = \begin{pmatrix} 0.9 \\ 0 \\ 0.3 \\ 0.6 \\ 0 \end{pmatrix}$ ;  $k = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.7 \\ 0.2 \\ 0.95 \end{pmatrix}$

### Задание № 5

Для расчета удельной изобарной теплоемкости газов используется зависимость

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^{-2}.$$

Оцените коэффициенты уравнения для воздуха по приведенным экспериментальным данным:

$t, ^\circ\text{C}$	0	25	50	75	100	125	150	175	200
$C_p, \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$	1014	1015	1017	1019	1022	1025	1028	1032	1036

### Задание № 6

Определить коэффициенты  $n$ , и  $k$  в уравнении распределения, связывающего содержание салициловой кислоты между водой  $c_w$  и бензолом  $c_b$ :

$$\frac{c_w^n}{c_b} = c_b k.$$

$c_w \cdot 10^{-3}, \text{ мол/л}$	3,63	6,68	9,40	12,6	21	28,3
$c_b \cdot 10^{-3}, \text{ мол/л}$	1,84	5,04	9,77	14,6	32,90	53,30

### . Задание №7

При моделировании неизотермического химического реактора учитывается изменение в ходе реакции концентраций компонентов  $C_i$  и температуры  $t$ , причем константы скоростей реакции  $k_j$  в свою очередь являются функциями температуры. Пусть изменение параметров описывается уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{d\tau} &= -2k_1 C_1^2; \\ \frac{dC_2}{d\tau} &= k_1 C_1^2; \\ \frac{dt_1}{d\tau} &= \frac{1}{\omega} \cdot \frac{dC_1}{d\tau} \cdot \frac{\Delta H}{C_{p1} \rho} - \frac{KF(t_1 - t_2)}{G_1 C_{p1} L}; \\ \frac{dt_2}{d\tau} &= \frac{KF(t_1 - t_2)}{G_2 C_{p2} L}; \\ k_1 &= k_0 e^{-\frac{E}{RT}}. \end{aligned}$$

Решить систему уравнений на интервале  $[0, \tau_k]$  с шагом  $\tau_k/15$ .

Исходные данные для контрольного расчета

$$\begin{aligned} k_0 &= 0,5; \quad E = 2000; \quad R = 8,31; \quad \tau_k = 3; \quad \omega = 0,5; \quad \Delta H = -1 \cdot 10^6; \\ \rho &= 980; \quad K = 220; \quad F = 24; \quad L = 3; \quad C_{p1} = 3900; \quad C_{p2} = 4180; \quad G_1 = 2.5; \end{aligned}$$

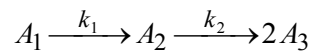
$$G_2 = 3.$$

Начальные значения параметров (функций)

$$C_1^0 = 0,85; \quad C_2^0 = 0; \quad t_1^0 = 80; \quad t_2^0 = 10.$$

### . Задание №8

Кинетика химического взаимодействия компонентов  $A_1, A_2, A_3$  в соответствии со схемой реакции



описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{d\tau} &= -k_1 C_1; \\ \frac{dC_2}{d\tau} &= k_1 C_1 - k_2 C_2; \\ \frac{dC_3}{d\tau} &= 2k_2 C_2. \end{aligned}$$

Рассчитать систему уравнений на интервале  $[0, \tau]$  с шагом  $\Delta\tau = \tau/20$ .

Результаты оформить в виде таблицы и графика. Исходные данные для контрольного расчета:

$$C_1^0 = 0,9; \quad C_2^0 = 0,2; \quad C_3^0 = 0,8; \quad k_1 = 0,3; \quad k_2 = 0,5; \quad \tau = 6.$$

### Задание №9

Решить систему нелинейных алгебраических уравнений относительно конечных концентраций компонентов сложной химической реакции, протекающей в реакторе идеального смешения:

$$\begin{aligned} C_1^k - C_1^0 &= \tau \cdot \left[ -2k_1 (C_1^k)^2 + 2k_2 C_2^k C_3^k \right] \\ C_2^k - C_2^0 &= \tau \cdot \left[ k_1 (C_1^k)^2 - k_2 C_2^k C_3^k \right] \\ C_3^k - C_3^0 &= \tau \cdot \left[ k_1 (C_1^k)^2 - k_2 C_2^k C_3^k - 2k_3 (C_3^k)^2 \right] \\ C_4^k - C_4^0 &= \tau k_3 (C_3^k)^2 \end{aligned}$$

Исходные данные для расчета:  $\tau = 5$ ;  $C^0 = \begin{pmatrix} 0,9 \\ 0 \\ 0,2 \\ 0,1 \end{pmatrix}$ ;  $k = \begin{pmatrix} 0,7 \\ 0,3 \\ 0,6 \end{pmatrix}$

### Задание №10

Решить систему нелинейных алгебраических уравнений относительно конечных концентраций компонентов сложной химической реакции, протекающей в реакторе идеального смешения:

$$\begin{aligned} C_1^k - C_1^0 &= \tau \cdot [-k_1 C_1^k + k_2 C_2^k C_3^k] \\ C_2^k - C_2^0 &= \tau \cdot [k_1 C_1^k - k_2 C_2^k C_3^k] \\ C_3^k - C_3^0 &= \tau \cdot [k_1 C_1^k - k_2 C_2^k C_3^k - 2k_3 (C_3^k)^2 + 2k_4 C_4^k] \\ C_4^k - C_4^0 &= \tau \cdot [k_3 (C_3^k)^2 - k_4 C_4^k] \end{aligned}$$

Исходные данные для расчета:  $\tau = 6$ ;  $C^0 = \begin{pmatrix} 0.9 \\ 0 \\ 0.2 \\ 0.1 \end{pmatrix}$ ;  $k = \begin{pmatrix} 0.7 \\ 0.1 \\ 0.3 \\ 0.2 \end{pmatrix}$

#### Критерии оценки задания

Отлично	Студент полностью самостоятельно правильно выполнил задание. Обоснован выбранный метод и ход решения. Продемонстрировано знание методов анализа результатов научного эксперимента, умение связывать теорию с практикой
Хорошо	Студент полностью выполнил задание. Обоснован выбранный метод и ход решения. При выполнении задания потребовались наводящие вопросы или были допущены незначительные ошибки, не влияющие на результат. Продемонстрировано знание учебного материала и понятийного аппарата, самостоятельность, умение делать выводы
Удовлетворительно	Студент полностью выполнил задание. Выбранный метод и ход решения не обоснованы. При выполнении задания потребовались наводящие вопросы или были допущены ошибки, исправленные после подсказки преподавателя. Продемонстрировано удовлетворительное знание учебного материала и понятийного аппарата, удовлетворительное умение делать выводы
Неудовлетворительно	Студент не выполнил задание или выполнил его неверно. Выбранный метод и ход решения не обоснованы. При выполнении задания потребовались наводящие вопросы и были допущены ошибки влияющие на результат. Продемонстрировано неудовлетворительно владение теоретическим материалом.

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущих и промежуточных аттестаций.

Текущие аттестации проводятся в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущие аттестации проводятся в форме контрольной работы и тестового

опроса в системе "Электронный университет ВГУ". Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Промежуточная аттестация (зачет с оценкой) проводится в форме индивидуального контрольного задания.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.

Для оценивания результатов обучения на промежуточной аттестации (зачет с оценкой) используются следующие показатели

- 1) знание учебного материала и понятийного аппарата по дисциплине «Компьютерные технологии в науке и образовании»
- 2) умение связывать теорию с практикой;
- 3) умение устанавливать междисциплинарные связи;
- 4) самостоятельность и обоснованность выводов;
- 5) владение навыками создания электронных образовательных ресурсов;
- 6) владение навыками использования информационно-коммуникационных технологий при решении научно-исследовательских задач.

Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Итоговая оценка (зачет с оценкой) при реализации дисциплины выставляется по результатам выполнения текущих аттестаций и итогового тестирования. В случае невозможности оценить работу по итогам текущих аттестаций, промежуточная аттестация проводится по контрольно-измерительным материалам для промежуточной аттестации.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценка за зачет также может быть выставлена по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.