

9. Цели и задачи изучения дисциплины:

Целью освоения учебной дисциплины «Компьютерные технологии научных исследованиях» 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 «Компьютерные технологии научных исследованиях» является дисциплиной обязательной части блока Б1 в структуре образовательной программы Магистратуры 04.04.01 Химия и изучается в 3 семестре.

Освоение дисциплины «Компьютерные технологии научных исследованиях» 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 ИТ-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: ИТ 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
			3
Аудиторные занятия		56	56
в том числе	практические занятия	18	168
	лабораторные	38	38
Самостоятельная работа		52	52
Форма промежуточной аттестации			
Зачет с оценкой			x
Итого:		108	108
Форма текущей аттестации			Контрольная работа

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
Практические занятия			
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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
1.2	Современные тенденции развития компьютерных технологий	Роль информационных технологий в социальной сфере, науке и промышленности. Сквозные цифровые технологии.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
1.3	Современные тенденции развития компьютерных технологий	Химическая информация в сети Интернет. Хемоинформатика	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
1.4	Современные тенденции развития компьютерных технологий	Цифровое образовательное пространство для профессиональной подготовки специалистов химического профиля	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
1.5	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований	Облачные ресурсы для решения задач научных исследований. Электронные журналы и конференции.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
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.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640

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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
Лабораторные работы			
2.1	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Анализ электронных учебно-методических систем профессиональной подготовки в области химии и химической технологии.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.2	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Анализ электронных сквозных цифровых технологий для научных исследований.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.3	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Информационные ресурсы научной информации. Анализ электронных баз данных патентов	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.4	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов	Информационные ресурсы научной информации. Анализ электронных баз данных патентов	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514

	химических исследований.		
2.5	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Информационные ресурсы научной информации. Анализ электронных баз данных научных публикаций по теме научных исследований	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.6	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Информационные ресурсы научной информации. Анализ электронных баз данных научных публикаций по теме научных исследований	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.7	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Информационные ресурсы научной информации. Научная статья, как результат отображения результатов научного исследования	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.8	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Подготовка научного доклада к конференции. Тезисы доклада.	ЭУМК "Компьютерные технологии в образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.9	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Подготовка научного доклада к конференции. Презентация.	ЭУМК «Компьютерные технологии в образовании» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514
2.10	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Подготовка научного доклада к конференции. Стендовый доклад	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.11	Применение компьютерных технологий для обработки и	Анализ изображений как инструмент получения данных об исследуемом объекте/системе.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании"

	анализа результатов химических исследований.		https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.12	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Анализ изображений как инструмент получения данных об исследуемом объекте/системе.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.13	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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.14	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	Применение методов численного интегрирования для решения химических задач.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.15	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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.16	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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.17	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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
2.18	Применение компьютерных технологий для обработки и	Способы и средства визуализации результатов научных экспериментов.	ЭУМК "Информационные технологии в науке и образовании"

	анализа результатов химических исследований.		https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640
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" https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2640

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.	8	0	22	30
2	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	10	38	30	78
	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, MTCLink, ЯндексТелемост 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 : учебное пособие : [16+] / И. А. Коноплева, О. А. Хохлова, А. В. Денисов ; под ред. И. А. Коноплевой. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Проспект, 2014. – 328 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=251652
2.	Паничев, С. А. Математические модели в естественных науках: химия : учебное пособие для вузов / С. А. Паничев, Л. П. Паничева, С. С. Волкова. — 2-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 265 с. — (Высшее образование). —Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/542476
3.	Миркин, Б. Г. Базовые методы анализа данных : учебник и практикум для вузов / Б. Г. Миркин. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 303 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-18842-4. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/551786

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Перевалов, В. П. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов / В. П. Перевалов, Г. И. Колдобский. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 53 с. — (Высшее образование). — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/544671
5.	Klapetek P. Руководство пользователя Gwyddion / Petr Klapetek, David Neřcas, Christopher Anderson: русский перевод: Д. Браташов // URL: http://gwyddion.net/download/user-guide/gwyddion-user-guide-ru.pdf
6.	Горленко, О. А. Дисперсионный анализ экспериментальных данных : учебное пособие для вузов / О. А. Горленко, Н. М. Борбаць, Т. П. Можаяева. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 132 с. — (Высшее образование). — Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/542513
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 : курс : учебное пособие / В. Д. Боев, Р. П. Сыпченко. — Москва : Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), 2010. — 455 с. : ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=233705
9.	Конюхов А.Л., Руководство к использованию программного комплекса ImageJ для обработки изображений: Учебное методическое пособие. — Томск: кафедра ТУ, ТУСУР, 2012. — 105 с.
10.	Цифровая обработка изображений в среде MATLAB: Пер. с англ. / Р. Гонсалес, Р. Вудс, С. Эддинс; пер. : В.В. Чепыжов. — М.: Техносфера, 2006. — 615 с.
11.	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.
12.	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 >. (дата обращения: 26.05.2024).

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

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

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: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-136.pdf >.
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: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf >.
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. - < https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=1514 >

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 (BigBlueButton, MTCLink, ЯндексТелемост и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров

При реализации дисциплины используются технологии:

1. Организация взаимодействия со студентами посредством мессенджера в ЭУМК, электронной почты - 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>, 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

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 вычислительная сеть, подключенную к сети Воронежского госуниверситета, 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	Тематическое практическое задание.
2	Применение компьютерных технологий для обработки и анализа результатов химических исследований.	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-3.3	Тематическое практическое задание
<p>Промежуточная аттестация форма контроля - зачет с оценкой При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценка за зачет может быть выставлена по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.</p>				<p>Практическое задание Тестовый опрос</p>

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: тематических практических заданий, контрольного задания по анализу изображений, контрольного расчетного задания

20.1.1. Вопросы тематических заданий, реализованных в электронном курсе на портале «Электронный университет ВГУ»: форум, Wiki-словарь, база данных

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 отражены в элементах курса (число записей и отзывов, сроки представления ответов). Тематические задания оцениваются по шкале: неудовлетворительно, удовлетворительно, хорошо, отлично

20.1.2 Контрольная работа по анализу изображений

Контрольное задание

Провести преобразование и анализ предложенного изображения (результат анализа сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и др.).

В качестве выбранного объекта анализа может быть изображение объекта, полученное в процессе выполнения НИР

Выбор изображения осуществляется случайным образом в задании курса "Компьютерные технологии в науке и образовании" на образовательном портале "Электронный университет ВГУ".

Отчёт должен представлять собой файл (doc, pdf), содержащий информацию об алгоритме выполнения задания и иллюстрации полученных результатов.

В отчете должна быть поставлена задача анализа и показаны результаты ее решения.

В зависимости от поставленной задачи результаты анализа должны содержать информацию, необходимую для характеристики объекта анализа:

распределении площадей, размеров объектов;

результаты аппроксимация распределения площадей (длин);

параметры пиков распределения высот при оценке степени развития поверхности (число пиков зависит от свойств изображения);

оценку параметров шероховатости (указать по скольким и каким профилям), если это поверхность;

оценку параметров выделенного двумерного объекта;

статистические оценки распределения высот и площадей и др.;

статистические оценки двумерных данных;

трёхмерное отображение данных.

Критерии оценки отчета:

1. Объект, цель и задачи анализа (2 б.)

2. Масштабирование изображения. Если нет информации о физических размерах изображенного объекта, назначаете самостоятельно (1 б.)

3. Выполнение только тех этапов анализа, которые необходимы для ответа на поставленные задачи (максимально 6 б.)

Описание использованного инструмента для получения необходимых данных (1 б.)

Приведение значений (результат - изображение, диаграмма распределения, максимальное, максимальное диапазон величин...),, полученных на данном этапе анализа - (2 б.)

Иллюстрация полученного результата средствами приложения (скрин таблицы данных, изображение этапа анализа (например, сформированная маска, диаграмма распределения размера, объемное представление глобулы...)). (2 б.)

5. Выводы по проведенному анализу (по решению тех задач, которые Вы поставили перед собой) (1 б.)

4. Выводы по применимости использованного инструмента (м.б. чего-то не хватает, что удобно, что не удобно) (1 б.)

Оценка за аттестацию переводится в шкалу: неудовлетворительно, удовлетворительно, хорошо, отлично

20.1.3 Контрольное расчетное задание

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:

x	1,20	1,57	1,94	2,31	2,68	3,05	3,42	3,79
y	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

Отлично	представлен рабочий проект, сделаны обоснованные выводы, продемонстрировано знание методов анализа результатов научного эксперимента, умение связывать теорию с практикой;
Хорошо	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
Удовлетворительно	представлен рабочий проект, допущены ошибки, не приводящие к неверным выводам. продемонстрировано удовлетворительное знание методов анализа результатов научного эксперимента.
Неудовлетворительно	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, тестовый опрос

20.2.1. 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/(м²·К); F – поверхность теплопередачи, м².

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 μ_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 $c_в$ и бензолом $c_б$:

$$\frac{c_в^n}{c_б} = c_б k.$$

$c_в \cdot 10^{-3}, \text{ мол/л}$	3,63	6,68	9,40	12,6	21	28,3
$c_б \cdot 10^{-3}, \text{ мол/л}$	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

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

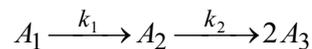
$$G_2 = 3.$$

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

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.

20.2.2 Тестовый опрос проводится средствами портала «Электронный университет ВГУ». Тестовый опрос формируется из 25 случайных тематических вопросов.

Критерии оценки тестового опроса:

«неудовлетворительно»	менее 50%
«удовлетворительно»	50-60%
«хорошо»	60-80%
«отлично»	более 80%

Примеры тестовых заданий:

Вопрос 1

Укажите этапы индексирования документа

Выберите один или несколько ответов:

1. Сопоставление содержания текста документа с терминами языка информационно-поисковой системы -
2. Выбор из индексируемого материала лексических единиц +
3. Формирование запроса с введением в него грамматических средств информационно-поискового языка или без них +
4. Преобразование выбранных лексических единиц естественного языка в лексические единицы информационно-поискового языка +
5. Извлечение из документов новых фактов или сведений –

Вопрос 2

Выберите правильные утверждения, характеризующие первичные документы

Выберите один или несколько ответов:

1. К первичным изданиям можно отнести картотеки -
2. Издания, в которых преимущественно содержатся новые сведения или новое осмысление известных идей и фактов +
3. Документах отражаются непосредственные результаты познания +
4. К первичным изданиям можно отнести сериальные издания +
5. К первичным изданиям можно отнести стандарты –

Вопрос 3

Выберите правильное определение

Система описания химических структур SMILES ...

1. Это формат, химические структуры в котором сохраняются в файлах с расширением sdf. Формат позволяет хранить одновременно химические и графические свойства молекулы. -
2. Базируется на текстовой системе tex. Формулы химических веществ описываются при помощи текстовых команд. Исходный текст конвертируется специальными программами в pdf или postscript формат. -
3. Является стандартом iupac. В этой системе каждое вещество имеет одно описание. В этом стандарте формула молекулы записывается в виде одной текстовой строки. Стандарт позволяет описывать только структурные формулы. -
4. Система для описания химических структур при помощи коротких текстовых описаний. В этой системе атомы обозначаются символами периодической системы в квадратных скобках, а атом водорода можно не указывать. Он добавляется

автоматически. Одинарные связи указывать не нужно, а двойные связи обозначаются символом '=', тройные - '#/ +

Вопрос 4

Установите соответствие между понятием и определением
Издания, предназначенные для быстрого получения каких-либо сведений научного, прикладного или познавательного характера

Ответ 1 Справочная литература

Справочное издание, содержащее краткие объяснения значений терминов той или иной отрасли науки и техники.

Ответ 2 Толковый словарь

Справочное издание, содержащее наиболее существенную (подробную или краткую) информацию по всем или по отдельным областям знания и практической деятельности

Ответ 3 Энциклопедия

Вопрос 5

Соотнесите общенаучные методы с их уровнем научного познания
Идеализация

Ответ 1 теоретический

Формализация

Ответ 2 теоретический

Наблюдение

Ответ 3 эмпирический

Измерение

Ответ 4 эмпирический

Эксперимент

Ответ 5 эмпирический

Вопрос 6

Установите соответствие.

В цветовой модели RGB света представлены следующими кодами:

R=0 G=0 B=255

Ответ 1 синий

R=0 G=255 B=0

Ответ 2 зеленый

R=0 G=0 B=0

Ответ 3 черный

R=255 G=0 B=0

Ответ 4 красный

R=255 G=255 B=255

Ответ 5 белый

Вопрос 7 (Эссе)

Внимательно прочтите информацию о публикации.

Укажите для данного варианта вопроса соответствие / несоответствие правилам оформления в предтекстовой части: **1) заглавия (Title) 2) аннотации/ abstract**

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{GeSe}_2-\text{SnSe}_2$

АННОТАЦИЯ:

Методами дифференциального термического и рентгенофазового анализа изучены фазовые равновесия в квазитройной системе $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{GeSe}_2-\text{SnSe}_2$. Построен ряд политермических сечений и изотермическое сечение при 750 К фазовой диаграммы, а также проекция поверхности ликвидуса, определены области первичной кристаллизации и гомогенности фаз, характер и температуры нон- и моновариантных равновесий. Установлено, что в системе образуются широкие области твердых растворов на основе соединений Cu_2GeSe_3 и Cu_2SnSe_3 вдоль разреза $\text{Cu}_2\text{GeSe}_3-\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$.

Критерий оценки ответа.

В ответе должна быть отражена оценка согласно следующим требованиям:

Заглавие	
Максимальная длина заглавия статьи 10–12 слов. Иногда разбиваются на части	2 балла
Аннотация	
Рекомендуемый объем аннотации – 200–250 слов.	2 балла
Цель статьи: актуальность, формулировка научной проблемы, цель статьи.	2 балла
Экспериментальная часть: даются сведения об объекте, конкретных методах исследования.	2 балла
Выводы: излагается краткая формулировка результатов исследования, основные положения, практическая и научная ценность.	2 балла

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 научных исследованиях»
- 2) умение связывать теорию с практикой;
- 3) умение устанавливать междисциплинарные связи;
- 4) самостоятельность и обоснованность выводов;
- 5) 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. 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.