

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ

Директор по образовательной  
деятельности

С.Т. Князев  
2020 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ**

Код модуля	Модуль
1143536	Компьютерные технологии

Екатеринбург, 2020

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Химия и физика новых функциональных материалов	<b>Код ОП</b> 1. 04.04.02/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Химия, физика и механика материалов	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 04.04.02

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Зуев Андрей Юрьевич	д.х.н., доцент	профессор	Физической и неорганической химии

**Согласовано:**

Управление образовательных программ



Р.Х. Токарева

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Компьютерные технологии

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль состоит из дисциплины «Компьютерные технологии в науке и образовании». В рамках модуля осуществляется интенсивное обучение студентов современным компьютерным технологиям моделирования и обработки результатов научных экспериментов, сбора, обработки, хранения и передачи информации в сочетании с активным использованием получаемых знаний в исследовательской работе по теме магистерской диссертации. Большое внимание уделяется самостоятельной работе, направленной, в том числе, на подготовку и представление студентом отчёта по информационному исследованию (обзору) проблемы, решаемой в рамках темы выпускной квалификационной работы. Это позволяет развивать навыки анализа научной проблемы и навыки представления и обработки результатов исследования на современном мировом уровне.

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Компьютерные технологии в науке и образовании	3
ИТОГО по модулю:		3

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	
Постреквизиты и корреквизиты модуля	

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Компьютерные технологии в науке и образовании	УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	3-1 - Демонстрировать понимание основных методов системного подхода и критического анализа проблемных ситуаций 3-2 - Определять этапы разработки стратегии действий и методы решения

		<p>проблемных ситуаций</p> <p>У-1 - Выявлять проблемные ситуации, используя методы системного подхода и критического анализа</p> <p>У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели с учетом ограничений, рисков и моделируемых</p> <p>У-3 - Анализировать проблемную ситуацию, выявлять и определять способы ее разрешения</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>П-2 - Использовать методы критического анализа и системного подхода в разработке стратегии действий для решения проблемных ситуаций</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p>
	<p>УК-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание процессов управления проектом, планирования ресурсов, критерии оценки рисков и результатов проектной деятельности</p> <p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Формулировать актуальность, цели, задачи, обосновывать значимость проекта, выбирать стратегию для разработки концепции проекта в рамках обозначенной проблемы</p> <p>У-2 - Прогнозировать ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в зависимости от типа проекта</p> <p>У-3 - Анализировать и оценивать риски и результаты проекта на каждом этапе его реализации и корректировать проект в соответствии с критериями, ресурсами и ограничениями</p>

		<p>П-1 - Составлять план проекта и график реализации, разрабатывать мероприятия по контролю его выполнения и оценки результатов проекта</p> <p>П-2 - Выбирать оптимальные способы решения конкретных задач проекта на каждом этапе его реализации на основе анализа и оценки рисков и их последствий с учетом ресурсов и ограничений</p> <p>Д-1 - Проявлять способность к поиску новой информации, умение принимать решения в нестандартных ситуациях</p> <p>Д-2 - Демонстрировать способность убеждать, аргументировать свою позицию</p>
	<p>УК-4 - Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия</p>	<p>З-1 - Определять специфику, разновидности, инструменты и возможности современных коммуникативных технологий для академического и профессионального взаимодействия</p> <p>З-2 - Излагать нормы и правила составления устных и письменных текстов для научного и официально-делового общения на родном и иностранном (-ых) языках</p> <p>У-1 - Анализировать и оценивать письменные и устные тексты для научного и официально-делового общения на родном и иностранном (-ых) языках на соответствие правилам и нормам и корректировать их</p> <p>У-2 - Воспринимать и анализировать содержание письменных и устных текстов на родном и иностранном (ых) языках с целью определения значимой информации</p> <p>У-3 - Выбирать инструменты современных коммуникативных технологий для эффективного осуществления академического и профессионального взаимодействия</p> <p>П-1 - Составлять устные и письменные тексты для научного и официально-</p>

		<p>делового общения на родном и иностранном (-ых) языках в соответствии с правилами и нормами</p> <p>П-2 - Осуществлять поиск вариантов использования инструментов современных коммуникативных технологий для решения проблемных ситуаций академического и профессионального взаимодействия</p> <p>Д-1 - Проявлять доброжелательность и толерантность по отношению к коммуникативным партнерам</p>
	<p>УК-7 - Способен обрабатывать, анализировать, передавать данные и информацию с использованием цифровых средств для эффективного решения поставленных задач с учетом требований информационной безопасности</p>	<p>З-1 - Сделать обзор угроз информационной безопасности, основных принципов организации безопасной работы в информационных системах и в сети интернет</p> <p>З-2 - Описать способы и средства защиты персональных данных и данных в организации в соответствии с действующим законодательством</p> <p>З-3 - Сделать обзор современных цифровых средств и технологий, используемых для обработки, анализа и передачи данных при решении поставленных задач</p> <p>У-1 - Определять основные угрозы безопасности при использовании информационных технологий и выбирать оптимальные способы и средства защиты персональных данных и данных организации от мошенников и вредоносного ПО</p> <p>У-2 - Выбирать современные цифровые средства и технологии для обработки, анализа и передачи данных с учетом поставленных задач</p> <p>П-1 - Обосновать выбор технических и программных средств защиты персональных данных и данных организации при работе с информационными системами на основе анализа потенциальных и реальных угроз безопасности информации</p> <p>П-2 - Решать поставленные задачи,</p>

		используя эффективные цифровые средства и средства информационной безопасности
	ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности	<p>З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Выбирать и использовать современные ИТ-технологии и базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий и баз данных</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические и системные умения, способность к поиску информации</p>
	ОПК-5 - Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях	<p>З-1 - Демонстрировать понимание правил оформления различных видов и способов представления результатов: научных и научно-технических отчетов, презентаций, публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров), стилей и норм научного письма на русском и английском языках</p> <p>З-2 - Соотносить правила проведения профессиональных дискуссий с их характером, и демонстрировать понимание особенностей научных дискуссий</p> <p>У-1 - Оценивать выполненные отчеты, презентации, научные публикации (доклады, статьи, тезисы к конференциям, обзоры) на соответствие нормам научного письма на русском и английском языках</p> <p>У-2 - Сформулировать аргументы для защиты результатов профессиональной</p>

		<p>деятельности в публичном пространстве</p> <p>П-1 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов, презентаций, научных публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров) по результатам деятельности в соответствии с правилами и нормами письма на русском и английском языках</p> <p>П-2 - Иметь опыт подготовки выступлений и ведения профессиональных дискуссий, выступлений на семинарах и/или конференциях</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии, физики и/или смежных наук</p>	<p>З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии физики и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии, физике и смежным областям</p>

### 1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в форме:

Очная

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Компьютерные технологии в науке и образовании**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Зувев Андрей Юрьевич	д.х.н., доцент	профессор	Физической и неорганической химии

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- Зуев Андрей Юрьевич, профессор, Физической и неорганической химии

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология;

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1.	Поисковые машины Интернета. Работа с общедоступными источниками информации	Различные браузеры: Internet Explorer, Google Chrome, Opera и другие. Поисковые машины Интернета: Яндекс, Rambler, Google, Yahoo!. Интернет - источник общедоступной информации на примере Wikipedia и ChemNet.
2.	Базы термодинамических и кинетических данных.	Ознакомление с учебными базами термодинамических данных (Ивтантермо, Термические константы вещества), электронными справочниками и рекомендациями IUPAC, другими источниками.
2.	Основные принципы проверки достоверности научных гипотез и математических моделей	Моделирование как способ проверки гипотез. Имитационное моделирование (вычислительный эксперимент). Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Прямая и обратная задачи моделирования. Особенности численного (компьютерного) моделирования
4.	Компьютерная обработка экспериментальных данных и визуализация полученных результатов	Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования. Минимизация суммы квадратов отклонений модели от экспериментальных данных по методу Гаусса - Ньютона. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. Нелинейный МНК. Программы обработки и визуализации данных на примере пакетов Maple и Origin.
5.	Компьютерное моделирование свойств вещества и химических превращений	Неэмпирические и эмпирические методы расчета строения молекул (GAMESS, MOPAC). Моделирование кинетики химических реакций (KINET). Расчет равновесного состава по термодинамическим свойствам веществ (ИВТАНТЕРМО). Моделирование с использованием пакетов компьютерной математики (Maple).
6.	Использование компьютерных программ для представления результатов	Использование компьютерных программ для представления результатов в электронном и печатном

	учебной и научной деятельности	виде с использованием программ Maple, Origin и пакетов Microsoft Office и OpenOffice.
7.	Компьютерные технологии в обмене учебной и научной информацией	Электронная почта, электронные научные журналы, дистанционное образование – размещенные в открытом доступе в Сети бесплатные учебные курсы (МООС — Massive Open Online Courses) и т.п. Видеоконференции и веб семинары, транслируемые по сети Интернет. Дистанционное обучение и автоматизированный контроль знаний.

1.3. Программа дисциплины реализуется:  
на государственном языке Российской Федерации.

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Электронные ресурсы (издания)

1. Model Curricula for Computing, Joint IEEE Computer Society/ACM,  
<http://www.computer.org/portal/web/education/EAB-Members>

2. ACM Special Interest Group on Computer Science Education <http://www.acm.org/sigcse/>

3. Закгейм, А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / А.Ю. Закгейм .— 3-е изд., перераб. и доп. — Москва : Логос, 2012 .— 304 с. — (Новая университетская библиотека) .— <http://biblioclub.ru/> .— ISBN 978-98704-471-1 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988>>.

### Печатные издания

1. Закгейм, Александр Юделевич. Введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для хим.-технол. спец. вузов / А. Ю. Закгейм .— 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Химия, 1982 .— 288 с. 51 экз.

### Профессиональные базы данных, информационно-справочные

1. A.Yu. Zuev, A.N. Nikitin. Chemical Equilibrium Computation. MapleSoft. Application Center: 2007.  
Режим доступа: URL:  
[http://www.maplesoft.com/applications/app\\_center\\_view.aspx?AID=2044&CID=3&SCID=41](http://www.maplesoft.com/applications/app_center_view.aspx?AID=2044&CID=3&SCID=41)

2. Зуев Андрей Юрьевич. Учебно-методический комплекс дисциплины "Моделирование реальной структуры и свойств материалов в среде Maple" [Электронный ресурс]  
<http://elar.urfu.ru/handle/10995/1322>

### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Ivtantermo

Термические константы веществ

### 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная	<b>Не предусмотрено</b>
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Компьютеры: - Системный блок DEPO (Intel Core i3, 3.30 GHz, ОЗУ 4 ГБ, HDD 500 ГБ), Монитор Nec AS221WM  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная	Операционная система Windows 7 Профессиональная – лицензия корпоративная УрФУ, срок действия - б/с, браузер Google Chrome – свободное ПО; Браузер Mozilla Firefox – свободное ПО; MS Office 2010 - Профессиональная плюс, срок действия – б/с  Неограниченный доступ к сети Интернет
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная	<b>Не предусмотрено</b>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная	<b>Не предусмотрено</b>