

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
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1143536	Компьютерные технологии

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Химия 2. Химия и физика новых функциональных материалов	Код ОП 1. 04.04.01/33.02 2. 04.04.02/33.01
Направление подготовки 1. Химия; 2. Химия, физика и механика материалов	Код направления и уровня подготовки 1. 04.04.01; 2. 04.04.02

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	физической и неорганической химии

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

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	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

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, в	3-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций

	<p>том числе в цифровой среде</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, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p>
	<p>УК-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</p>	<p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</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>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>У-3 - Выбирать инструменты современных коммуникативных технологий для эффективного осуществления академического и профессионального взаимодействия</p> <p>П-2 - Осуществлять поиск вариантов использования инструментов современных коммуникативных технологий для решения проблемных ситуаций академического и профессионального взаимодействия</p>

	Д-1 - Проявлять доброжелательность и толерантность по отношению к коммуникативным партнерам
УК-7 - Способен обрабатывать, анализировать, передавать данные и информацию с использованием цифровых средств для эффективного решения поставленных задач с учетом требований информационной безопасности	<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, используя эффективные цифровые средства и средства информационной безопасности</p>
ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области	<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,</p>

	<p>профессиональной деятельности</p>	<p>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>
	<p>ОПК-5 - Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях</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 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>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность в подготовке материалов научных исследований к публичному доступу</p>
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>(Химия)</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</p>

		<p>тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>
<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>(Химия)</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 и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>	
<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>(Химия)</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 и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>	
<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии, физики и/или смежных наук</p> <p>(Химия и физика новых функциональных материалов)</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,</p>	

		базами данных по химии, физике и смежным областям
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии, физики и/или смежных наук</p> <p>(Химия и физика новых функциональных материалов)</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>
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии, физики и/или смежных наук</p> <p>(Химия и физика новых функциональных материалов)</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 очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Компьютерные технологии в науке и
образовании

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	Кафедра физической химии

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Зуев Андрей Юрьевич, Профессор, физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

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.
3	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	Неэмпирические и эмпирические методы расчета строения молекул (GAMESS, MOPAC). Моделирование кинетики

	вещества и химических превращений	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 учебной и научной деятельности	Использование компьютерных программ для представления результатов в электронном и печатном 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. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации /полностью на иностранном языке.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерные технологии в науке и образовании

Электронные ресурсы (издания)

1. Закгейм, А. Ю.; Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие.; Логос, Москва; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988> (Электронное издание)
2. Заварухин, С. Г.; Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов : учебное пособие.; Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=576798> (Электронное издание)
3. ; Modeling in Physics and Math's Education: The materials of Russian-German Seminar in Moscow-Cologne, 2013 : материалы конференций.; Московский педагогический государственный университет (МПГУ), Москва; 2014; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=598963> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Ratzlaff, Ratzlaff K.; Introduction to Computer-Assisted Experimentation; John Willey and Sons, New York; Chichester; Brisben; Toronto; 1987 (1 экз.)
2. Закгейм, А. Ю.; Введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для хим.-технол. спец. вузов.; Химия, Москва; 1982 (51 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

American Chemical Society

eLibrary

ООО Научная электронная библиотека

Elsevier

ScienceDirect Freedom Collection

Scopus

SpringerLink

Springer Nature

Web of Science Core Collection

Web of Science

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

1. 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>

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

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерные технологии в науке и образовании

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
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	OriginPro

		<p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Maple 11</p>
3	Консультации	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>OriginPro</p> <p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Maple 11</p>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>OriginPro</p> <p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Maple 11</p>
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>OriginPro</p> <p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Maple 11</p>