

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Луганский государственный университет
имени Владимира Даля»
(ФГБОУ ВО «ЛГУ им. В. Даля»)
Северодонецкий технологический институт
Кафедра химических технологий**

УТВЕРЖДАЮ:
Врио. директора СТИ (филиал)
ФГБОУ ВО «ЛГУ им. В. Даля»
Ю.В. Бородач
(подпись)
« 26 » 2024 года



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
«Компьютерные и информационные технологии в химической технологии»**

По направлению подготовки: 18.04.01 Химическая технология

Профиль: «Химическая технология»

Северодонецк – 2024

Лист согласования РПУД

Рабочая программа учебной дисциплины «Компьютерные и информационные технологии в химической технологии» по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология– 22с.

Рабочая программа учебной дисциплины «Компьютерные и информационные технологии в химической технологии» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (утвержденная приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 07.08.2020г. № 910, с изменениями и дополнениями от _____ 20__ г.).

СОСТАВИТЕЛЬ:

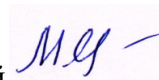
к.т.н., доцент кафедры химических технологий



М.А. Ожередова

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры химических технологий «23» 09 2024 г., протокол № 2

Ио заведующего кафедрой химических технологий



М.А. Ожередова

Переутверждена: «__» _____ 20__ г., протокол № _____

СОГЛАСОВАНА(для обеспечивающей кафедры):

Переутверждена: «__» _____ 20__ года, протокол № _____

Рекомендована на заседании учебно-методической комиссии Северодонецкого технологического института «23» 09 2024 г., протокол № 2.

Председатель учебно-методической комиссии
СТИ (филиал) ФГБОУ ВО «ЛГУ им. В. Даля»



Ю.В. Бородач

Структура и содержание дисциплины

1. Цели и задачи дисциплины, ее место в учебном процессе

Цель изучения дисциплины – формирование у магистрантов углубленных знаний в области современных компьютерных технологий, развитие информационной культуры, подготовку их к профессиональной деятельности в сфере науки и образования.

Задачи изучения дисциплины: ознакомление студентов с современным информационным и прикладным программным обеспечением для компьютерного моделирования технологических процессов и систем; выработка умения поставить типовые задачи и разработать математические модели процессов химической технологии; обучение использованию специальных пакетов прикладных программ при расчетах на ПК.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Логико-структурный анализ дисциплины: курс входит в обязательную часть блока 1 «Дисциплины (модули)» подготовки студентов по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология».

Основывается на базе дисциплин: Высшая математика, Информационные технологии, Моделирование систем и процессов, Основы научных исследований предыдущего уровня образования.

Является основой для изучения следующих дисциплин: Системы искусственного интеллекта, Основы технологического проектирования химических производств, научно-исследовательская работа, производственная и преддипломная практики, написание магистерской работы.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижений компетенции (по реализуемой дисциплине)	Перечень планируемых результатов
ПК-1. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК 1.1. Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования ПК-1.2. Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований ПК-1.3. Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства	Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками фор-

	на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий	мулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий
ПК-8. Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ; математическое моделирование для описания и прогнозирования процессов и характеристик систем, осуществлять их качественный и количественный анализ	ПК-8.1. Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления ПК-8.2 Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем ПК-8.3 Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий	Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий

4. Структура и содержание дисциплины (модуля)

4.1 Объем учебной дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Объем часов (зач. ед.)	
	Очная форма	Заочная форма
Общая учебная нагрузка (всего)	108	-
Обязательная контактная работа (всего)	56	-
в том числе:	-	-
Лекции	28	-
Семинарские занятия	-	-
Практические занятия	28	-
Лабораторные работы	-	-
Курсовая работа (курсовой проект)	-	-
Другие формы и методы организации образовательного процесса (расчетно-графические работы, индивидуальные задания и т. п.)	-	-
Самостоятельная работа студента (всего)	52	-
Форма аттестации	Экзамен	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии.

Тема 2. Программы для оформления результатов научной работы.

Компьютерные программы для генерации первичных документов и обеспечения большей эффективности и экономии времени научного исследования. Концепция рабочего

места учёного (scientific workplace). Программы для оформления результатов научной работы и визуализации экспериментальных данных в виде графиков, гистограмм, диаграмм и т.д.

Программы, используемые для верстки в научных издательствах (коммерческие и бесплатные): LaTeX, Adobe Acrobat, Scribus.

Продукты фирмы Microsoft: текстовый редактор Word, электронные таблицы Excel, программа для создания презентаций PowerPoint. Open-source аналоги: Open Office, LibreOffice и др.

Программы для составления библиографических списков. Возможности программ Endnote, Mendeley и др.

Программы для математических расчетов: Maple, MathCad, Mathematica.

Универсальные статистические программы SPSS и STATISTICA. Программы для построения графиков: Origin, Grapher.

Специализированные химические пакеты: ISIS, ChemOffice, ACD Labs.

Тема 3. Компьютерные технологии в химической технологии.

Компьютерные программы для решения химических задач. Задачи, требующие большой вычислительной мощности: квантово-химические расчеты, построение моделей реакций и растворов. Задачи, не требующие высокой вычислительной мощности: отображение экспериментальных данных с их последующей обработкой. Автоматизация рутинных процедур. Сопряжение приборов и ПК.

Тема 4. Компьютерная обработка экспериментальных данных. Программы обработки и визуализации данных.

Графическая визуализация вычислений в химической технологии. Расчет технологических процессов на основе физико-химических параметров, расчет материального и теплового балансов (программный комплекс HYSIS). Расчет оборудования, подбор из типового набора (ChemCAD). Компьютерное моделирование аварийных ситуаций STOA.

Тема 5. Математические методы компьютерного моделирования.

Конструирование и разработка математических моделей процессов. Специальные интерфейсы для химической технологии. Экспертная система компьютерного моделирования, оптимизации и экономической оценки статических и динамических режимов химико-технологических процессов и систем на основе программного комплекса ASPENPLUS.

Тема 6. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet.

Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet. Специализированные мета-сайты и поисковые машины. Постановка задачи поиска и формулирование запроса. Платный и бесплатный доступ к информации.

Основные принципы построения научных баз данных. Обработка баз данных, поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях. Серверные базы данных. Построение форм запросов, методы сортировки.

Принципы организации баз научных и справочных данных. Банк термодинамических данных NIST, банк данных по органическим реакциям orgsyn.com, рекомендации IUPAC, информационные возможности ChemWeb, Scirus.com.

Базы данных для библиометрического анализа; специализированные и междисциплинарные базы данных; особенности баз данных Института научной информации (ISI). Особенности базы данных National Science Indicators, примеры анализа количественных показателей исследовательской активности в разных странах мира; понятие "impact"; сопоставительный анализ библиометрических показателей, отражающий уровень развития научных исследований в различных странах и различных предметных областях.

Научные электронные издания. Сайты издательств. Материалы конференций. Электронные библиотеки. Патентные базы (IBM, USPTO, espacenet). Специализированные библиографические поисковые машины (WPINDEX, STN). Поиск химической информации (Beilstein Commander, SciFinder).

Тема 7. Использование компьютеров в получении химического образования.

Справочные программы. Средства дистанционного обучения. Научно-методические основы и инструментальные средства создания электронных учебных пособий. Язык разметки HTML. Виды материалов, необходимых для дистанционного обучения.

Системы массового онлайн-обучения: Coursera, Edx, Academic Earth и др.

Компьютерные обучающие системы и их виды. Обучающие программы для школы и отдельных химических дисциплин высшего образования. Контролирующие и тестовые программы. Тренажеры. Компьютерное моделирование в обучении. Программы проблемного подхода. Экспертные системы и искусственный интеллект.

Программы специального назначения для преподавателя (LMS42, Moodle и т.п.). Разработка обучающих программ. Проблемы и перспективы. Мультимедиа в обучении химии. Примеры программного обеспечения.

4.3 Лекции

№ п/п	Название темы	Объем часов	
		Очная форма	Заочная форма
1.	Тема 1. Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии	4	-
2.	Тема 2. Программы для оформления результатов научной работы	4	-
3.	Тема 3. Компьютерные технологии в химической технологии	4	-
4.	Тема 4. Компьютерная обработка экспериментальных данных. Программы обработки и визуализации данных	4	-
5.	Тема 5. Математические методы компьютерного моделирования	4	-
6.	Тема 6. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet.	4	-
7.	Тема 7. Использование компьютеров в получении химического образования.	4	-
Итого:		28	-

4.4 Практические (семинарские) занятия

№ п/п	Название темы	Объем часов	
		Очная форма	Заочная форма
1.	Тема 1. Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии	4	-
2.	Тема 2. Программы для оформления результатов научной работы	4	-
3.	Тема 3. Компьютерные технологии в химической технологии	4	-
4.	Тема 4. Компьютерная обработка экспериментальных данных. Программы обработки и визуализации данных	4	-
5.	Тема 5. Математические методы компьютерного моделирования	4	-
6.	Тема 6. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet.	4	-
7.	Тема 7. Использование компьютеров в получении химического образования.	4	-
Итого:		28	-

4.5 Лабораторные работы по дисциплине «Компьютерные и информационные технологии в отрасли» не предусмотрены учебным планом.

4.6 Самостоятельная работа студентов

№ п/п	Название темы	Вид СРС	Объем часов	
			Очная форма	Заочная форма
1.	Тема 1. Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	7	-
2.	Тема 2. Программы для оформления результатов научной работы	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	8	-
3.	Тема 3. Компьютерные технологии в химической технологии	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	7	-
4.	Тема 4. Компьютерная обработка экспериментальных данных. Программы обработки и визуализации данных	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	8	-
5.	Тема 5. Математические методы компьютерного моделирования	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	7	-
6.	Тема 6. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям.	8	-
7.	Тема 7. Использование компьютеров в получении химического образования.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям	7	-
Итого:			52	-

4.7 Курсовые работы/проекты по дисциплине «Компьютерные и информационные технологии в отрасли» не предполагаются учебным планом.

5. Образовательные технологии

В процессе обучения для достижения планируемых результатов освоения дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- традиционные объяснительно-иллюстративные технологии, которые обеспечивают доступность учебного материала для большинства студентов, системность, отработанность организационных форм и привычных методов, относительно малые затраты времени;
- информационно-коммуникационная технология, в том числе визуализация, создание электронных учебных материалов;
- использование электронных образовательных ресурсов при подготовке к лекциям, практическим и лабораторным занятиям;
- технология проблемного обучения, в том числе в рамках разбора проблемных ситуаций;
- технология развивающего обучения, в том числе постановка и решение задач от менее сложных к более сложным, развивающих компетенции студентов.

В рамках перечисленных технологий основными методами обучения являются: работа в команде, самостоятельная работа, проблемное обучение.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература

1. Малахова, Ю. Н. Информационные технологии в химии: учебно-методическое пособие / Ю. Н. Малахова, Т. Е. Григорьев, С. Н. Чвалун. — Москва : РТУ МИРЭА, 2022. — 47 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/265592>.
2. Зайцев, М. А. Информационные технологии в обучении химии : учебно-методическое пособие : в 2 частях / М. А. Зайцев. — Киров : ВятГУ, [б. г.]. — Часть 1 : Материалы для самостоятельной работы студентов — 2017. — 109 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/134625>
3. Леонович, А. А. Основы научных исследований : учебное пособие / А. А. Леонович, А. В. Шелоумов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Санкт-Петербург : СПбГЛТУ, 2020. — 100 с. — ISBN 978-5-9239-1144-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/133738>.
4. «Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/206195>».

б) дополнительная литература:

1. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов [Электрон. ресурс]: Учебник для вузов /В.М. Вержбицкий - М.: Директ-Медиа, 2013. - 847с. - Режим доступа: <http://www.knigafund.ru/184789> ЭБС «КнигаФонд»
2. Вержбицкий, В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения) [Электрон. ресурс]: Учеб. пособие для вузов /В.М. Вержбицкий - М.: Директ-Медиа, 2013. - 400с. - Режим доступа: <http://www.knigafund.ru/180826> ЭБС «КнигаФонд»
3. Сабитов К.Б. Уравнения математической физики [Электрон. ресурс] / К.Б. Сабитов - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 352 с. - Режим доступа: <http://www.knigafund.ru/174658> ЭБС «КнигаФонд» б) дополнительная учебная литература Треногин В.А. Уравнения в частных производных [Электрон. ресурс] / В.А. Треногин, И.С. Недосекина - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 228 с. - Режим доступа: <http://www.knigafund.ru/174657> ЭБС «КнигаФонд».

в) методические указания:

1. Курзин, А.В. Химические редакторы [Текст]: учеб. пос. / А.В. Курзин, Л.М. Попова, А.Н. Евдокимов. — СПб.: СПбГТУРП, 2014.— 125 с. Режим доступа: <http://www.nizrp.narod.ru/metod/kaforgchem/3.pdf> ЭБ ВШТЭ.

г) интернет-ресурсы:

1. edu – «Российское образование» Федеральный портал. Каталог образовательных интернет-ресурсов: Российское образование. Законодательство. Нормативные документы и стандарты. Образовательные учреждения. Каталог сайтов (можно выбрать: предмет, аудитория, уровень образования, тип ресурса) и электронных библиотек. Учебно-методическая библиотека;
2. ed.gov – «Федеральное агентство по образованию РФ». - Управление образованием. Обеспечение учебного процесса (нормативно-правовые документы; Информация; Новости; Статистика и др.);
3. mon.gov – Официальный сайт Минобразования и науки РФ;
4. rost.ru/projects – Национальный проект «Образование»;
5. . window.edu.ru – Единое окно доступа к образовательным ресурсам. Тематический каталог образовательных ресурсов;
6. . <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/> – Электронная библиотека учебных материалов по химии портала фундаментального химического образования России ChemNet.;

7. <http://www.nigma.ru> – Интеллектуальная поисковая система Нигма.РФ;
8. <http://www.xumuk.ru/bse/3009.html> – Химик.ру (сайт о химии).
9. <https://elibrary.ru> - Российская электронная библиотека. Полные тексты зарубежных и отечественных научных изданий.

д) программное обеспечение

1. Adobe Reader
2. FoxitReader
3. PowerPoint
4. ChemDraw

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Аудитория для проведения лекционных занятий, оборудованная учебной мебелью: сто-лы, стулья для обучающихся; стол, стул для преподавателя; доска, набор демонстраци-онного оборудования (экран-1, проектор-1, компьютер-1, ноутбук-1)

2. Аудитория для лабораторных занятий, оснащенная измерительными приборами и лабо-раторными установками для изучения дисперсных систем.

Шкаф вытяжной (лаб-1200-ШВ-Н), Шкафы для хранения химических реактивов, мойка, столы химические, табуреты, аудиторная доска (меловая), стол, стул для преподава-теля.

Комплект химической посуды в соответствии с тематикой проводимых лабораторных занятий;

Комплект химических реактивов в соответствии с тематикой проводимых лаборатор-ных занятий.

Стенды по тематике дисциплин:

- периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева - 1 шт.,
- растворимость кислот, оснований и солей в воде - 1 шт.,
- ряд стандартных электродных потенциалов - 1 шт.

3. Аудитория для проведения занятий семинарского типа, практических занятий, груп-повых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации обучающихся, оснащенная столом на 30 посадочных мест, рабочим местом преподавателя, а также набором демонстрационного оборудования: мультимедиа проектор, ноутбук и экран с электроприводом.

4. Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченные доступом к электронной информационно-образовательной среде Университета.

5. Хранение учебного оборудования и профилактическое обслуживание учебного обо-рудования для организации лабораторных занятий производится в аудитории, оснащенной шкафами и стеллажами, а также комплектами инструментов.

8. Оценочные средства по дисциплине
Паспорт
оценочных средств по учебной дисциплине
«Компьютерные и информационные технологии в химической технологии»

Описание уровней сформированности и критериев оценивания компетенций на этапах их формирования в ходе изучения дисциплины

Этап	Код-компетенции	Уровни сформированности компетенции	Критерии оценивания компетенции
Начальный	ПК-1	Пороговый ПК 1.1. Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования	знает: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования
Основной		Базовый ПК-1.2. Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований	умеет: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований
Заключительный		Высокий ПК-1.3. Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий	владеет: Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий

Начальный	ПК-8	Пороговый ПК-8.1. Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления	Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления
Основной		Базовый ПК-8.2 Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем	Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем
Заключительный		Высокий ПК-8.3 Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий	Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий

Перечень компетенций (элементов компетенций), формируемых в результате освоения учебной дисциплины

№ п/п	Код компетенции	Формулировка контролируемой компетенции	Индикаторы достижения компетенции (по дисциплине)	Темы учебной дисциплины	Этапы формирования (семестр изучения)
1.	ПК-1	Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК 1.1. Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования ПК-1.2. Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды;	Тема 1-7	1-й семестр

			проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований ПК-1.3. Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий		
2	ПК-8	Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ; математическое моделирование для описания и прогнозирования процессов и характеристик систем, осуществлять их качественный и количественный анализ	ПК-8.1. Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления ПК-8.2 Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем ПК-8.3 Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий	Тема 1-7	1-й семестр

Показатели и критерии оценивания компетенций, описание шкал оценивания

№ п/п	Код компетенции	Индикаторы достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Контролируемые темы учебной дисциплины	Наименование оценочного средства
1.	ПК-1.	ПК 1.1. Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования ПК-1.2. Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований ПК-1.3. Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации	Знать: основные методы поиска, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации по теме исследования; основные источники научно-технической информации; основные методы, используемые при проведении научного исследования Уметь: находить и систематизировать информацию из научных источников по тематике научно-исследовательской работы; формулировать конкретные задачи, выбирать в соответствии с поставленной задачей методы исследования; составлять аналитические обзоры и реферировать научные труды; проводить первичную обработку данных для проведения научных исследований Владеть: навыками самостоятельной научной работы: проведение и анализ научной проблемы, составление обзоров литературы и поиск решения проблемы по конкретной научной тематике; навыками формулирования практических рекомендаций в области технологий химического производства на основе результатов научных исследований; навыками проведения эмпирических и	Тема 1. Тема 2. Тема 3. Тема 4. Тема 5. Тема 6. Тема 7.	Контрольная работа (пороговый уровень), письменная работа ((реферат) базовый уровень), тестирование (высокий уровень), экзамен

		из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий	прикладных исследований в области технологий химического производства; навыками обработки информации из различных источников, в том числе с использованием современных информационных технологий		
2	ПК-8	ПК-8.1. Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления ПК-8.2 Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем ПК-8.3 Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий	Знать: современные базовые методы, используемые при осуществлении проектной деятельности; методики контроля процесса и качества материалов и способы их осуществления Уметь: строить и использовать математические модели для описания и прогнозирования химико-технологических процессов и характеристик систем Владеть: навыками использования пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ при внедрении новых технологий	Тема 1. Тема 2. Тема 3. Тема 4. Тема 5. Тема 6. Тема 7.	Контрольная работа (пороговый уровень), письменная работа ((реферат) базовый уровень), тестирование (высокий уровень), экзамен

Фонды оценочных средств по дисциплине
«Компьютерные и информационные технологии в отрасли»
Вопросы для контрольной работы
(пороговый уровень)

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.
3. Химические редакторы. Назначение и возможности.
4. Электронные энциклопедии, справочники и книги по химии и химической технологии.
5. Базы данных и электронные библиотеки по химии.
6. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
7. Системы управления библиографическими базами данных.
8. Предварительный анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений.
9. Статистическая обработка экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов.
10. Планирование кинетического эксперимента. Прямая и обратная задачи химической кинетики.

11. Электронные таблицы и программы для статистического и регрессионного анализа и визуализации данных.
12. Основные принципы компьютерной обработки УФ-, ИК- и ЯМР- спектров.
13. Характеристика специализированных программных пакетов для квантово-химических расчетов.
14. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
15. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии.
16. Неэмпирические методы расчета.
17. Способы расчета термодинамических параметров химических соединений.
18. Универсальные математические пакеты.
19. Методы численного интегрирования.

Критерии и шкала оценивания по оценочному средству «контрольная работа»

Шкала оценивания (интервал баллов)	Критерий оценивания
5	Контрольная работа выполнена на высоком уровне (правильные ответы даны на 90 – 100% вопросов/задач)
4	Контрольная работа выполнена на среднем уровне (правильные ответы даны на 75 – 89% вопросов/задач)
3	Контрольная работа выполнена на низком уровне (правильные ответы даны на 50 – 74% вопросов/задач)
2	Контрольная работа выполнена на неудовлетворительном уровне (правильные ответы даны менее чем на 50%)

**Реферат
(базовый уровень)**

1. Основные этапы развития информационных технологий. Информационное общество.
2. Взаимосвязь понятий «данные», «информация», «знание». Способы хранения и передачи информации.
3. Этапы развития вычислительной техники и компьютерных технологий.
4. Вычислительные сети: локальные, региональные, мировые, Интернет.
5. Концепция рабочего места учёного (scientific workplace).
6. Офисные пакеты. Сравнение функциональных возможностей отдельных программ и пакетов в целом на примере Microsoft Office, Open Office, LibreOffice и др.
7. Программы для математических расчетов: Maple, MathCad, Mathematica.
8. Программы для построения графиков: Origin, Grapher, Microsoft Excel. Достоинства и недостатки.
9. Возможности программ для составления библиографических списков: Endnote, Mendeley, JabRef.
10. Программы, используемые для верстки в научных издательствах: LaTeX. Adobe Acrobat, Scribus.
11. Специализированные химические пакеты: ISIS, ChemOffice, ACD Labs.
12. Квантово-химические расчеты, построение моделей реакций и растворов.
13. Отображение экспериментальных данных с их последующей обработкой. Автоматизация рутинных процедур.
14. Применение компьютеров в органическом синтезе. Ретросинтетический анализ. Планирование синтеза.
15. Три основных аспекта компьютерного синтеза: представление и анализ химических структур, представление и анализ химических реакций-трансформаций, критерии отбора.
16. Расчет структуры и энергии молекул. Расчеты по методу Хюккеля и его модификациям. Расчеты методами молекулярной механики. Полуэмпирические методы расчета.

17. Программы расчета характеристик молекул, кинетических параметров, межфазового равновесия.

Критерии и шкала оценивания по оценочному средству «реферат»

Шкала оценивания (интервал баллов)	Критерий оценивания
5	Реферат представлен на высоком уровне (студент в полном объеме осветил рассматриваемую проблематику, привел аргументы в пользу своих суждений, владеет профильным понятийным (категоричным) аппаратом и т. п.) Оформлен в соответствии с требованиями, предъявляемыми к данному виду работ
4	Реферат представлен на среднем уровне (студент в целом осветил рассматриваемую проблематику, привел аргументы в пользу своих суждений, допустив некоторые неточности и т. п.). В оформлении допущены некоторые неточности в соответствии с требованиями, предъявляемыми к данному виду работ
3	Реферат представлен на низком уровне (студент допустил существенные неточности, изложил материал с ошибками, не владеет, в достаточной степени, профильным категориальным аппаратом и т. п.). В оформлении допущены ошибки в соответствии с требованиями, предъявляемыми к данному виду работ
2	Реферат представлен на неудовлетворительном уровне или не представлен (студент не готов, не выполнил задание и т. п.)

**Тестирование
(высокий уровень)**

- Выберите программы для квантового-химических расчетов
 - ChemSketch;
 - Hyperchem;
 - ChemWin;
 - Gaussian.
- Выберите программы для расчета физических и термодинамических свойств
 - PhysProps;
 - ChemKin;
 - ChemMaths;
 - ReactOp.
- Выберите программы для регрессионного и статистического анализа
 - DataFit;
 - OriginLab;
 - ChemPen;
 - Statistica.
- Выберите модули, которые должна содержать универсальная моделирующая программа
 - библиотека модулей для расчета химико-технологических аппаратов;
 - модуль для представления структурных формул;
 - банк физико-химических свойств;
 - библиотека математических модулей.
- Базы данных, которые содержат извлеченную из документов / публикаций (статей, патентов и др.) и объединенную в отдельную для каждого документа запись информацию об их заглавиях, авторах, источниках:
 - полнотекстовые;
 - структурно-химические;
 - фактографические;

- г) библиографические;
 д) справочники.
6. Индивидуальные регистрационные номера соединений, помещаемые в базу данных Registry, используемые для однозначной идентификации химических веществ
- а) InChI;
 б) IUPAC Name;
 в) CAS;
 г) SMILES.
7. Пакет программ Process Engineering Suite разработан компанией:
- а) Invensys Process Systems;
 б) Aspen Technologies;
 в) ChemStations;
 г) Microsoft.
8. Система, способная получать, накапливать и корректировать знания, из некоторой предметной области выводить новые знания, решать на основе этих знаний практические задачи и объяснять ход их решения это:
- а) экспертная система;
 б) база данных;
 в) информационная система;
 г) банк данных.
9. Совокупность технического, программного и организационного обеспечения, а также персонала, предназначенная для того, чтобы своевременно обеспечивать надлежащих людей надлежащей информацией это
- а) экспертная система;
 б) база данных;
 в) информационная система;
 г) банк данных.
10. Организованная совокупность блоков информационных элементов, представленных на машиночитаемых носителях, предназначенных и пригодных для оперативного решения пользовательских, служебных и других задач с использованием средств вычислительной техники это:
- а) экспертная система;
 б) база данных;
 в) информационная система;
 г) банк данных

Критерии и шкала оценивания по оценочному средству «тестирование»

Шкала оценивания (интервал баллов)	Критерий оценивания
5	85 -100% правильных ответов
4	71-85% правильных ответов
3	61-70% правильных ответов
2	60% правильных ответов и ниже

Вопросы к экзамену:

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.
3. Химические редакторы. Назначение и возможности.
4. Электронные энциклопедии, справочники и книги по химии и химической технологии.
5. Базы данных и электронные библиотеки по химии.

6. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
7. Системы управления библиографическими базами данных.
8. Предварительный анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений.
9. Статистическая обработка экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов.
10. Планирование кинетического эксперимента. Прямая и обратная задачи химической кинетики.
11. Электронные таблицы и программы для статистического и регрессионного анализа и визуализации данных.
12. Основные принципы компьютерной обработки УФ-, ИК- и ЯМР-спектров.
13. Характеристика специализированных программных пакетов для квантово-химических расчетов.
14. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
15. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии.
16. Неэмпирические методы расчета.
17. Способы расчета термодинамических параметров химических соединений.
18. Универсальные математические пакеты.
19. Методы численного интегрирования.
20. Тактика и стратегия поиска информации в сети Internet. Специализированные мета-сайты и поисковые машины. Постановка задачи поиска и формулирование запроса.
21. Основные принципы построения научных баз данных. Обработка баз данных, поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях. Серверные базы данных. Построение форм запросов, методы сортировки.
22. Принципы организации баз научных и справочных данных. Банк термодинамических данных NIST, банк данных по органическим реакциям orgsyn.com, рекомендации IUPAC.
23. Информационные возможности ChemWeb, SciFinder, Scirus.com.
24. Базы данных для библиометрического анализа; специализированные и междисциплинарные базы данных; особенности баз данных Института научной информации (ISI).
25. Примеры анализа количественных показателей исследовательской активности в разных странах мира; понятие "impract"; сопоставительный анализ библиометрических показателей, отражающий уровень развития научных исследований в различных странах и различных предметных областях.
26. Научные электронные издания. Сайты издательств. Материалы конференций.
27. Электронные библиотеки. Патентные базы (IBM, USPTO, espacenet). Специализированные библиографические поисковые машины (WPINDEX, STN).
28. Поиск химической информации (Beilstein Commander, SciFinder).
29. Средства дистанционного обучения. Научно-методические основы и инструментальные средства создания электронных учебных пособий. Виды материалов, необходимых для дистанционного обучения.
30. Системы массового онлайн-обучения: Coursera, Edx, Academic Earth и др.
31. Компьютерные обучающие системы и их виды. Обучающие программы для школы и отдельных химических дисциплин высшего образования.
32. Контролирующие и тестовые программы. Тренажеры. Компьютерное моделирование в обучении. Программы проблемного подхода. Экспертные системы и искусственный интеллект.
33. Программы специального назначения для преподавателя (LMS42, Moodle и т.п.). Разработка обучающих программ. Проблемы и перспективы. Мультимедиа в обучении химии.

**Критерии и шкала оценивания к промежуточной аттестации
«экзамен»**

Шкала оценивания	Характеристика знания предмета и ответов
отлично (5)	Студент глубоко и в полном объеме владеет программным материалом. Грамотно, исчерпывающе и логично его излагает в устной или письменной форме. При этом знает рекомендованную литературу, проявляет творческий подход в ответах на вопросы и правильно обосновывает принятые решения, хорошо владеет умениями и навыками при выполнении практических задач
хорошо (4)	Студент знает программный материал, грамотно и по сути излагает его в устной или письменной форме, допуская незначительные неточности в утверждениях, трактовках, определениях и категориях или незначительное количество ошибок. При этом владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических задач
удовлетворительно (3)	Студент знает только основной программный материал, допускает неточности, недостаточно четкие формулировки, непоследовательность в ответах, излагаемых в устной или письменной форме. При этом недостаточно владеет умениями и навыками при выполнении практических задач. Допускает до 30% ошибок в излагаемых ответах
неудовлетворительно (2)	Студент не знает значительной части программного материала. При этом допускает принципиальные ошибки в доказательствах, в трактовке понятий и категорий, проявляет низкую культуру знаний, не владеет основными умениями и навыками при выполнении практических задач. Студент отказывается от ответов на дополнительные вопросы

10. Особенности организации обучения для лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

При необходимости рабочая программа учебной дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК). В случае необходимости обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося), а для инвалидов также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида могут предлагаться следующие варианты восприятия учебной информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников, например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения – аудиально;

- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной (модулем), за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение электронного обучения, дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;

- применение электронного обучения, дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;

- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;

- продолжительность сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, – не более чем на 90 минут;

- продолжительность подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, – не более чем на 20 минут;

- продолжительность выступления обучающегося при защите курсовой работы – не более чем на 15 минут.

- реализация РПД может осуществляться с использованием дистанционных технологий в части освоения следующих разделов (видов контактной работы): *(приводятся разделы или виды контактной работы)*.

- при проведении практических (лабораторных) занятий обеспечивается возможность освоения практических навыков обучающимся с ОВЗ с учетом его индивидуальных физических возможностей.

- форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине устанавливается для обучающихся с ОВЗ с учетом индивидуальных психофизических особенностей (уст-но, письменно на бумаге, письменно на компьютере, в форме тестирования и т.п.).

- при проведении промежуточного контроля обучающемуся при необходимости предоставляется ассистент.

Лист изменений и дополнений

№ п/п	Виды дополнений и изменений с указанием страниц	Дата и номер протокола заседания кафедры (кафедр), на котором были рассмотрены и одобрены изменения и дополнения	Подпись (с расшифровкой) заведующего кафедрой (заведующих кафедрами)
1.			
2.			
3.			
4.			

« _____ » 202__ г.

Основная литература:

- Дополнительная литература:

- Преподаватель _____ (подпись) _____ (И.О.Ф.)