



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

«СОГЛАСОВАНО»
Руководитель ОП

(подпись)

Красицкая С.Г.

« » 2021 г.

«УТВЕРЖДАЮ»

Заведующий кафедрой Общей,
неорганической и элементоорганической
химии



(подпись)

Капустина А.А.

« » 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Цифровые технологии в химии и химических производствах

Направление подготовки 04.04.01 Химия

Магистерская программа

«Фундаментальная химия (совместно с ИХ ДВО РАН и ТИБОХ ДВО РАН)»

Форма подготовки очная

курс 1 семестр 2

лекции 00 час.

практические занятия 34 час.

лабораторные работы 00 час.

в том числе с использованием МАО лек. - / пр. - / лаб. 00 час.

всего часов аудиторной нагрузки 34 час.

в том числе с использованием МАО 00 час.

самостоятельная работа 74 час.

в том числе на подготовку к экзамену - час.

контрольные работы (количество) не предусмотрены

курсовая работа / курсовой проект не предусмотрены

зачет 2 семестр

экзамен не предусмотрен

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 04.04.01 **Химия**, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 07 июля 2017 г. №655

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры Общей, неорганической и элементоорганической химии

протокол № от « » 20 г.

Заведующий кафедрой _____

Составитель (ли): д.т.н., профессор кафедры ПММУиПО Гриняк В.М., ассистент кафедры ПММУиПО Гуляева К.А.

Владивосток

2021

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № ____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № ____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № ____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры/департамента:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № ____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

Цели и задачи освоения дисциплины:

Цель: формирование знаний о некоторых современных расчетно-теоретических методах химии и об информационных системах для решения профессиональных задач в избранной области химии, химического производства или смежных наук.

Задачи:

- знакомство с методами цифровой трансформации предприятий химической промышленности;
- обучение навыкам работы с профессиональными базами данных для проведения исследований в области химии или смежных наук;
- знакомство с профессиональным программным обеспечением для решения научных задач в избранной области химии, химического производства или смежных наук;
- рассмотрение классов задач профессиональной деятельности и способов их решения с помощью средств интеллектуальных систем.

Для успешного изучения дисциплины «Цифровые технологии в химии и химических производствах» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- способность вести научную дискуссию, владение нормами научного стиля современного русского языка;
- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу.

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие общепрофессиональные компетенции:

Наименование категории (группы) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

	назначения	
Компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	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 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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	Знает основные методики получения и характеристики веществ и материалов.
	Умеет использовать некоторые существующие методики получения и характеристики веществ и материалов.
	Владеет навыками разработки новых методик характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.
ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	Знает основные типы оборудования, программного обеспечения и специализированных баз данных, необходимых для работы профессионального химика.
	Умеет определять необходимое программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения поставленной задачи.
	Владеет навыками использования современного программного обеспечения и профессиональных баз данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.
ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	Знает современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.
	Умеет использовать некоторые современные расчетно-теоретические методы химии.
	Владеет навыками применения современных расчетно-теоретических методов химии для решения профессиональных задач.
ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	Знает различные типы представления информации химического профиля.
	Умеет использовать некоторые современные ИТ-технологии при сборе и анализе информации химического профиля.
	Владеет навыками применения современных ИТ-технологий при сборе и анализе информации химического профиля.
ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.	Знает некоторые программные продукты, необходимые для решения задач профессиональной деятельности.
	Умеет использовать стандартные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.
	Владеет навыками использования стандартных и оригинальных программных продуктов, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.	Знает некоторые современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента.
	Умеет использовать современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента.
	Владеет современными вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента., моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

2. Трудоёмкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы (108 академических часа).

(1 зачетная единица соответствует 36 академическим часам)

Видами учебных занятий и работы обучающегося по дисциплине являются:

Обозначение	Виды учебных занятий и работы обучающегося
Пр	Практические работы
СР	Самостоятельная работа обучающегося

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная.

№	Наименование раздела дисциплины	Семестр	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося						Формы промежуточной аттестации
			Лек	Лаб	Пр	ОК	СР	Контроль	
1	Раздел I. Цифровые технологии в химических производствах.	2	-	-	20	-	74	-	УО-1; ПР-4; ПР-9
2	Раздел II. Цифровые технологии в химии.				14				
Итого:			-	-	34	-	74	-	

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лекционные занятия (00 час.)

Лекции учебным планом не предусмотрены

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Практические занятия (34 часа)

Раздел I. Цифровые технологии в химических производствах. (20 часов)

Занятие 1. Цифровая трансформация промышленного предприятия. (4 часа)

1. Сквозные цифровые технологии.
2. Стратегия цифровой трансформации.
3. Оценка уровня автоматизации на производстве: ключевые показатели.

Занятие 2. Интернет вещей. IoT и PoT. (4 часа)

1. Архитектура промышленного интернета вещей.
2. Управление данными с подключенных устройств.

Занятие 3. Промышленная робототехника. (4 часа)

1. Промышленные роботы FANUC.
2. Промышленные роботы KUKA.

Занятие 4. Большие данные. (4 часа)

1. 5 V's больших данных.
2. Технологии работы с большими данными.

Занятие 5. AR и VR. (4 часа)

1. Основные понятия.
2. Обучение, удаленная экспертиза, моделирование экспериментов и другие сферы применения AR и VR в химической промышленности и науке.

Раздел II. Цифровые технологии в химии. (14 часов)

Занятие 6. Химические базы данных. (6 часов)

1. Основные понятия. СУБД.
2. Классификация баз данных.
3. Работа с БД: CRUD операции.
4. Базы данных химических соединений: CAS Registry, PDB.
5. Базы данных химических реакций: Reaxys.
6. Патентные базы данных.
7. Способы представления химических данных для последующей компьютерной обработки.

Занятие 7. Машинное обучение. (2 часа)

1. Обучение с учителем.
2. Обучение без учителя.
3. Обучение с подкреплением.

Занятие 8. Искусственный интеллект. (6 часов)

1. Основные понятия и история возникновения.
2. Сильный и слабый искусственный интеллект.
3. Способы представления знаний.
4. Экспертные системы. Проект Dendral.

5. Основные классы задач интеллектуальной деятельности. Примеры.

Задания для самостоятельной работы

Требования:

1. К устному опросу необходимо готовиться по каждой теме занятия.
2. Перед защитой своей индивидуальной письменной работы обучающемуся необходимо подготовить текст работы в соответствии с ГОСТ 7.32-2002 «Отчет о научно-исследовательской работе» или методическими рекомендациями ДВФУ. Для публичного представления результатов индивидуальной письменной работы обучающемуся необходимо подготовить презентацию (например, с помощью ПО Microsoft PowerPoint) и устное выступление, отражающее ключевые положения индивидуальной письменной работы обучающегося.

Самостоятельная работа № 1. Подготовка к устному опросу.

Требования. Отчет осуществляется в форме устного опроса (УО-1) по теме занятия. Обучающемуся необходимо знать основные определения и ключевые положения пройденной темы. Желательно во время обсуждения новой темы на занятии хорошо вести конспект, по которому можно затем готовиться самостоятельно.

Самостоятельная работа №2. Реферат по одной из тем курса.

Требования. Задание индивидуальное. Отчет по теме осуществляется в форме реферата (ПР-4). Каждый студент выбирает один из вопросов практических занятий или его часть для написания реферата. При желании обучающийся может выбрать свой **вариант** темы, аналогичной теме практического занятия, для написания реферата. Задание включает в себя следующие подзадачи:

1. Подготовить текст реферата.
2. Подготовить публичное выступление по теме реферата (презентацию и устный доклад по основным положениям реферата).

Тематика рефератов

1. Архитектура промышленного интернета вещей
2. Промышленные роботы KUKA.
3. Работа с БД: CRUD операции.
4. Базы данных химических соединений: CAS Registry, PDB.
5. и т.д.

Самостоятельная работа № 3. Проект «Программное обеспечение в химии и химических производствах».

Требования. Задание индивидуальное. Отчет по теме осуществляется в форме проекта (ПР-9). Каждый студент выбирает программное обеспечение (ПО), используемое для научных или инженерных задач в химии или химических производствах (например, одно из списка ниже «Тематика индивидуальных проектов»). Задание включает в себя следующие подзадачи:

1. Подготовить текст проекта о выбранном ПО. Текст должен включать следующие элементы:
 - a. назначение ПО;
 - b. основные функции ПО;
 - c. атрибуты качества ПО;
 - d. системные требования ПО;
 - e. особенности пользовательского интерфейса ПО;
 - f. решение с помощью описываемого ПО некоторой задачи (постановка задачи, входные данные задачи, выходные данные задачи, алгоритм решения задачи с использованием выбранного ПО);
 - g. приложение (принтскрины графиков, диалоговых окон, элементов пользовательского интерфейса выбранного ПО).
2. Подготовиться к публичной защите проекта (сделать презентацию и устный доклад по основным положениям разделов проекта).

Тематика индивидуальных проектов

1. КОМПАС 3D
2. ЯМР софт: Spin Works
3. «ES8» для потенциостатов
4. ChemLab
5. Honeywell UniSim Design
6. Gaussian
7. Origin
8. ACDLabs
9. Hysys
10. TopSpin 4.x.x для спектрометров ЯМР
11. PRIMUS для обработки спектров малоуглового рентгеновского рассеяния
12. ChemPen3D
13. ChemOffice
14. BATE

15. WinNormos для обработки мессбауэровских спектров
16. Discovery Studio (Dassault Systemes BIOVIA (formerly Accelrys))
17. GROMACS
18. NAMD
19. и т.д.

III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

№ п/п	Дата/сроки выполнения	Вид самостоятельной работы	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
1	В течение семестра	Подготовка проекта	30 часов	ПР-9 (Проект)
2	В течение семестра	Подготовка реферата	12 часов	ПР-4 (Реферат)
3	1-2 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
4	3-4 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
5	5-6 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
6	7-8 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
7	9-10 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
8	11-13 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
9	14 неделя семестра	Выполнение самостоятельной	4 часа	УО-1 (собеседование/устный

		работы № 1		опрос)
10	15-17 неделя семестра	Выполнение самостоятельной работы № 1	4 часа	УО-1 (собеседование/устный опрос)
Итого:			74 часа	

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

Планирование и организация времени, отведенного на выполнение заданий самостоятельной работы.

Изучив график выполнения самостоятельных работ, следует правильно её организовать. Рекомендуется изучить структуру каждого задания, обратить внимание на график выполнения работ, отчетность по каждому заданию предоставляется в последнюю неделю согласно графику. Обратите внимание, что итоги самостоятельной работы влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины.

Работа с литературой.

При выполнении ряда заданий требуется работать с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ (<http://www.dvfu.ru/library/>) и других ведущих вузов страны, а также доступных для использования научно-библиотечных систем.

В процессе выполнения самостоятельной работы, в том числе при написании реферата и выполнении проекта рекомендуется работать со следующими видами изданий:

а) Научные издания, предназначенные для научной работы и содержащие теоретические, экспериментальные сведения об исследованиях. Они могут публиковаться в форме: монографий, научных статей в журналах или в научных сборниках;

б) Учебная литература подразделяется на:

- учебные издания (учебники, учебные пособия, тексты лекций), в которых содержится наиболее полное системное изложение дисциплины или какого-то ее раздела;

- справочники, словари и энциклопедии – издания, содержащие краткие сведения научного или прикладного характера, не предназначенные для сплошного чтения. Их цель – возможность быстрого получения самых общих представлений о предмете.

Существуют два метода работы над источниками:

– сплошное чтение обязательно при изучении учебника, глав монографии или статьи, то есть того, что имеет учебное значение. Как правило, здесь требуется повторное чтение, для того чтобы понять написанное. Старайтесь при

сплошном чтении не пропускать комментарии, сноски, справочные материалы, так как они предназначены для пояснений и помощи. Анализируйте рисунки (карты, диаграммы, графики), старайтесь понять, какие тенденции и закономерности они отражают;

– метод выборочного чтения дополняет сплошное чтение; он применяется для поисков дополнительных, уточняющих необходимых сведений в словарях, энциклопедиях, иных справочных изданиях. Этот метод крайне важен для повторения изученного и его закрепления, особенно при подготовке к зачету.

Для того чтобы каждый метод принес наибольший эффект, необходимо фиксировать все важные моменты, связанные с интересующей Вас темой.

Тезисы – это основные положения научного труда, статьи или другого произведения, а возможно, и устного выступления; они несут в себе большой объем информации, нежели план. Простые тезисы лаконичны по форме; сложные – помимо главной авторской мысли содержат краткое ее обоснование и доказательства, придающие тезисам более весомый и убедительный характер. Тезисы прочитанного позволяют глубже раскрыть его содержание; обучаясь излагать суть прочитанного в тезисной форме, вы сумеете выделять из множества мыслей авторов самые главные и ценные и делать обобщения.

Конспект – это способ самостоятельно изложить содержание книги или статьи в логической последовательности. Конспектируя какой-либо источник, надо стремиться к тому, чтобы немногими словами сказать о многом. В тексте конспекта желательно поместить не только выводы или положения, но и их аргументированные доказательства (факты, цифры, цитаты).

Писать конспект можно и по мере изучения произведения, например, если прорабатывается монография или несколько журнальных статей.

Составляя тезисы или конспект, всегда делайте ссылки на страницы, с которых вы взяли конспектируемое положение или факт, – это поможет вам сократить время на поиск нужного места в книге, если возникает потребность глубже разобраться с излагаемым вопросом или что-то уточнить при написании письменных работ.

Методические рекомендации по выполнению заданий для самостоятельной работы и критерии оценки.

Самостоятельная работа №1. От обучающегося требуется:

1. Свободно ориентироваться в основных понятиях темы занятия.
2. Знать ключевые положения темы занятия.

Собеседование (устный опрос) позволяет оценить знания и кругозор студента, умение логически построить ответ, владение монологической речью и

иные коммуникативные навыки.

Опрос – важнейшее средство развития мышления и речи. Обучающая функция опроса состоит в выявлении деталей, которые по каким-то причинам оказались недостаточно осмысленными в ходе учебных занятий и при подготовке задания по самостоятельной работе.

Критерии оценки. Используется зачетная система. Во время опроса допускается не более 1-й ошибки или неточности в основных понятиях темы занятия и ключевых положениях темы.

Самостоятельная работа №2. Отчет по теме осуществляется в форме реферата. Реферат, как оценочное средство, позволяет оценить умение обучающегося письменно излагать суть поставленного вопроса, самостоятельно проводить анализ, формулировать выводы. Реферат предоставляется в письменном виде.

Критерии оценки.

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, реферировать литературные источники; методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области. Реферат характеризуется смысловой цельностью, связностью и последовательностью изложения. Студент умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки.
«не зачтено»	Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Студент не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники. Реферат не выполнен.

Самостоятельная работа №3. Отчет по теме осуществляется в форме проекта. Проект, как оценочное средство, позволяет оценить умение обучающегося письменно излагать суть поставленного вопроса, самостоятельно проводить анализ, формулировать выводы. Проект предоставляется в письменном виде.

Критерии оценки.

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, реферировать литературные источники; методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области. Проект характеризуется смысловой цельностью, связностью и последовательностью изложения. Студент умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки.
«не зачтено»	Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Студент не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные

	выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники. Проект не выполнен.
--	--

IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины	Код индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства – наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Раздел I. Цифровые технологии в химических производствах.	ОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	Знает различные типы представления информации химического профиля.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 1-5
			Умеет использовать некоторые современные IT-технологии при сборе и анализе информации химического профиля.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	
			Владеет навыками применения современных IT-технологий при сборе и анализе информации химического профиля.	ПР-9 Проект	
		ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.	Знает некоторые программные продукты, необходимые для решения задач профессиональной деятельности.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 1-5
			Умеет использовать стандартные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	
			Владеет навыками использования стандартных и оригинальных программных продуктов, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.	ПР-9 Проект	
		ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента,	Знает некоторые современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 1-5
			Умеет использовать современные вычислительные методы	УО-1 собеседование / устный опрос;	

		моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.	для обработки данных химического эксперимента.	ПР-4 реферат	
			Владеет современными вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента., моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.	ПР-9 Проект	
2	Раздел II. Цифровые технологии в химии.	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	Знает основные методики получения и характеристики веществ и материалов.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 6-14
			Умеет использовать некоторые существующие методики получения и характеристики веществ и материалов.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	
			Владеет навыками разработки новых методик характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	
		ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	Знает основные типы оборудования, программного обеспечения и специализированных баз данных, необходимых для работы профессионального химика.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 6-14
			Умеет определять необходимое программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения поставленной задачи.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	
			Владеет навыками использования современного программного обеспечения и профессиональных баз данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	ПР-9 Проект	
		ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных	Знает современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	вопросы к зачету 6-14
			Умеет использовать некоторые современные расчетно-теоретические методы химии.	УО-1 собеседование / устный опрос; ПР-4 реферат	

		задач.	Владеет навыками применения современных расчетно-теоретических методов химии для решения профессиональных задач.	ПР-9 Проект	
--	--	--------	--	-------------	--

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также качественные критерии оценивания, которые описывают уровень сформированности компетенций, представлены в разделе VIII.

V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Батоврин В.К. Системная и программная инженерия. Словарь-справочник [Электронный ресурс]: учебное пособие для вузов/ Батоврин В.К.— Электрон. текстовые данные.— Саратов: Профобразование, 2017.— 280 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/63956.html>.

2. Гагарина, Л. Г. Технология разработки программного обеспечения : учеб. пособие / Л.Г. Гагарина, Е.В. Кокорева, Б.Д. Сидорова-Виснадул ; под ред. Л.Г. Гагариной. — Москва : ИД «ФОРУМ» : ИНФРА-М, 2019. — 400 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-104071-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1011120>

3. Долженко А.И. Технологии командной разработки программного обеспечения информационных систем [Электронный ресурс]: курс лекций/ Долженко А.И.— Электрон. текстовые данные.— Москва: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Ай Пи Эр Медиа, 2019.— 300 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/79723.html>.

4. Зубкова Т.М. Технология разработки программного обеспечения [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Зубкова Т.М.— Электрон. текстовые данные.— Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2017.— 469 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/78846.html>.

5. Киселева Т.В. Программная инженерия. Часть 1 [Электронный

ресурс]: учебное пособие/ Киселева Т.В.— Электрон. текстовые данные.— Ставрополь: Северо-Кавказский федеральный университет, 2017.— 137 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/69425.html>.

6. Синицын С.В. Верификация программного обеспечения [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Синицын С.В., Налютин Н.Ю.— Электрон. текстовые данные.— Москва, Саратов: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Вузовское образование, 2017.— 368 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/67396.html>.

7. Соловьев Н.А. Введение в программную инженерию [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Соловьев Н.А., Юркевская Л.А.— Электрон. текстовые данные.— Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2017.— 112 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/71267.html>.

Дополнительная литература

1. Engel, T. Databases and Data Sources in Chemistry // Chemoinformatics: A textbook / ed. by J. Gasteiger, T. Engel – Weinheim: Wiley-VCH, 2003 – p.227-290

2. Браудэ Э. Технология разработки программного обеспечения, Издательский дом «Питер», 2004. - 656 с.<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:232388&theme=FEFU>

3. Вигерс К. И. Разработка требований к программному обеспечению (2е издание). Издательство: MicrosoftPress, Русская Редакция, 2004. 576 с. <http://gendocs.ru/v34772/?cc=1&view=pdf>

4. Жоголев Е.А. Технология программирования. М.: Научный мир. 2004. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:7891&theme=FEFU>

5. Иванова Г.С. Технология программирования. М.: Изд-во МТУ. 2002. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:398553&theme=FEFU>

6. Котляров, В. П. Основы тестирования программного обеспечения: учебное пособие /В. П. Котляров, Т. В. Коликова. Москва: Интернет-

Университет Информационных Технологий: БИНОМ. Лаборатория знаний ,2012. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:668103&theme=FEFU>

7. Круз, Р. Структуры данных и проектирование программ: [учебное пособие] / Р. Круз; пер. с англ. К.Г. Финогенова. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 765 с. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:274777&theme=FEFU>

8. Липаев, В.В. Программная инженерия. Методологические основы [Текст]: Учеб. / В. В. Липаев; Гос. ун-т — Высшая школа экономики. — М.: ТЕИС, 2006. — 608 с. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:248067&theme=FEFU>

9. Орлов С.А. Технологии разработки программного обеспечения: разработка сложных программных систем: учебник для вузов /С.А. Орлов. – М.:Санкт-Петербург : Питер , 2004. - 526 с. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:232481&theme=FEFU>

10. Соммервилл И. Инженерия программного обеспечения. 6-е издание. М.: Изд. дом Вильямс, 2002. – 624 с. <http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:735&theme=FEFU>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <https://proizvodstvo.zyfra.com/> Онлайн-курс от компании «Цифра» на платформе Stepik.

2. <http://docs.cntd.ru/document/gost-r-iso-mek-12207-2010> ГОСТ Р ИСО/МЭК 12207-2010. Информационная технология. Системная и программная инженерия. Процессы жизненного цикла программных средств. Дата введения 2012-03-01.

3. <http://www.osp.ru/os/2006/01/380743/> Рейс У. Адаптивный стиль управления программными проектами // Открытые системы, 2006, № 1.

Перечень информационных технологий и программного обеспечения

При осуществлении образовательного процесса студентами и профессорско-преподавательским составом используется следующее программное обеспечение:

1. Microsoft Office (PowerPoint, Word и Visio, Teams).
2. Open Office.
3. Skype.

При осуществлении образовательного процесса студентами и профессорско-преподавательским составом используются следующие информационно-справочные системы:

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.
2. Электронно-библиотечная система издательства «Лань».
3. Электронная библиотека "Консультант студента".
4. Электронно-библиотечная система IPRbooks.
5. Информационная система "ЕДИНОЕ ОКНО доступа к образовательным ресурсам".
6. Доступ к электронному заказу книг в библиотеке ДВФУ, доступ к нормативным документам ДВФУ, расписанию, рассылке писем.

Практические занятия проводятся с использованием проектора и мультимедийного комплекса для проведения лекций внутренней системы портала ДВФУ. Практические занятия проводятся в специализированном компьютерном классе.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. База данных Scopus <http://www.scopus.com/home.url>
2. База данных Web of Science <http://apps.webofknowledge.com/>
3. База данных полнотекстовых академических журналов Китая <http://oversea.cnki.net/>
4. Электронные базы данных EBSCO <http://search.ebscohost.com/>

VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Планирование и организация времени, отведенного на изучение дисциплины. Приступить к освоению дисциплины следует незамедлительно в самом начале учебного семестра. Рекомендуется изучить структуру и основные положения Рабочей программы дисциплины. Обратит внимание, что кроме аудиторной работы (практические занятия) планируется самостоятельная работа, итоги которой влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины. Все задания (аудиторные и самостоятельные) необходимо выполнять и предоставлять на оценку в соответствии с графиком.

В процессе изучения материалов учебного курса предлагаются следующие формы работ: практические занятия и задания для самостоятельной работы.

Практические занятия акцентированы на наиболее принципиальных и проблемных вопросах курса и призваны стимулировать выработку практических умений.

Особо значимой для профессиональной подготовки студентов является *самостоятельная работа* по курсу. В ходе этой работы студенты отбирают необходимый материал по изучаемому вопросу и анализируют его. Студентам необходимо ознакомиться с основными источниками, без которых невозможно полноценное понимание проблематики курса.

Освоение курса способствует развитию навыков обоснованных и самостоятельных оценок фактов и концепций. Поэтому во всех формах контроля знаний, особенно при сдаче зачета, внимание обращается на понимание проблематики курса, на умение практически применять знания и делать выводы.

Работа с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ и электронные библиотеки (<http://www.dvfu.ru/library/>), а также доступные для использования другие научно-библиотечные системы.

Подготовка к зачету. К сдаче зачета допускаются обучающиеся, выполнившие все самостоятельные задания, предусмотренные учебной программой дисциплины, посетившие не менее 85% аудиторных занятий.

VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

Материально-техническое и программное обеспечение дисциплины

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
690922, Приморский край, г. Владивосток, остров Русский, полуостров Саперный, поселок Аякс, 10, корпус D, ауд. D 733,733а. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Помещение укомплектовано специализированной учебной мебелью (посадочных мест – 13) Оборудование: ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 CCBA – 1 шт. Доска аудиторная, Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK с лицензионными программами Microsoft Office 2013(13 шт.) и аудиовизуальными средствами проектор Panasonic DLPPjectorPT-D2110XE	1С Предприятия8 (8.2), 7-Zip, ABBYY Lingvo12,Alice 3, Anaconda3,Autodesk,CodeBlocks,CorelDRAW X7,Dia,Directum4.8,DosBox-0.74,Farmanager,Firebird 2.5,FlameRobin,Foxit Reader,Free Pascal,Geany,Ghostscript,Git,Greenfoot,gsview,Inscapе0.91,Java, Java development Kit,Kaspersky,Lazarus,LibreOffice4.4,MatLab R2017b,Maxima 5.37.2,Microsoft Expression,Microsoft Office 2013,Microsoft Silverlight,Microsoft Silverlight 5SDK-русский,MicrosoftSistem Center,Microsoft Visial Studio 2012,MikTeX2.9,MySQL,NetBeans,Notepad++,Oracle VM VirtualBox,PascalABC.NET,PostgreSQL 9.4,PTC Mathcad,Putty,PyQt GPL v5.4.1 for Pythonv 3.4,Pyton2.7(3.4,3.6),QGIS Brighton,RStudio,SAM CoDeC Pack,SharePoint,Strawberry Perl,Tecnomatix,TeXnicCenter,TortoiseSVN,Unity2017.3.1f1,Vueusz,Vim8.1,Visual Paradigm CE,Visual Studio2013,Windows Kits,Windows Phone SDK8.1,Xilinx Design ToolsAcrobat ReaderDC,AdobeBridge CS3,AdobeDeviceCentralCS3,Adobe ExtendScript Toolkit 2,Adobe Photoshope CS3,DVD-студия Windows,GoogleChrome,Internet Explorer,ITMOproctor,Mozilla Firefox, Visual Studio Installer,Windows Media Center, WinSCP

Для освоения дисциплины требуется наличие проектора, аудиторная доска, компьютер.

Для проведения учебных занятий по дисциплине, а также для организации самостоятельной работы студентам доступно лабораторное оборудование и специализированные кабинеты, соответствующие действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-производственных работ.

В целях обеспечения специальных условий обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ДВФУ все здания оборудованы пандусами, лифтами, подъемниками, специализированными местами, оснащенными туалетными комнатами, табличками информационно-навигационной поддержки.

VIII. ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Для дисциплины «Цифровые технологии в химии и химических производствах» используются следующие оценочные средства:

Устный опрос:

1. Собеседование (УО-1)

Письменные работы:

1. Реферат (ПР-4)
2. Проект (ПР-9)

Устный опрос

Устный опрос позволяет оценить знания и кругозор студента, умение логически построить ответ, владение монологической речью и иные коммуникативные навыки.

Обучающая функция состоит в выявлении деталей, которые по каким-то причинам оказались недостаточно осмысленными в ходе учебных занятий и при подготовке к зачёту.

Собеседование (УО-1) – средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Письменные работы

Письменный ответ приучает к точности, лаконичности, связности изложения мысли. Письменная проверка используется во всех видах контроля и осуществляется как в аудиторной, так и во внеаудиторной работе.

Реферат (ПР-4) - продукт самостоятельной работы обучающегося, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно-исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее.

Проект (ПР-9) - конечный продукт, получаемый в результате планирования и выполнения комплекса учебных и исследовательских заданий. Позволяет оценить умения обучающихся самостоятельно конструировать свои знания в процессе решения практических задач и проблем, ориентироваться в информационном пространстве и уровень сформированности аналитических, исследовательских навыков, навыков практического и творческого мышления. Может выполняться в индивидуальном порядке или группой обучающихся.

Методические рекомендации, определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины

Оценочные средства для промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Цифровые технологии в химии и химических производствах» проводится в соответствии с

локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Форма отчётности по дисциплине – зачет (2-й, весенний семестр). Зачет по дисциплине включает ответы на 2 вопроса. Один из вопросов из первого раздела. Он направлен на раскрытие студентом знаний по проблемам цифровизации химических производств. Второй вопрос касается цифровых технологий в химии.

Методические указания по сдаче зачета

Зачет принимается ведущим преподавателем. При большом количестве групп у одного преподавателя или при большой численности потока по распоряжению заведующего кафедрой (заместителя директора по учебной и воспитательной работе) допускается привлечение в помощь ведущему преподавателю других преподавателей.

В исключительных случаях, по согласованию с заместителем директора Школы по учебной и воспитательной работе, заведующий кафедрой имеет право принять зачет в отсутствие ведущего преподавателя.

Форма проведения зачета (устная, письменная и др.) утверждается на заседании кафедры по согласованию с руководителем в соответствии с рабочей программой дисциплины.

Во время проведения зачета студенты могут пользоваться рабочей программой дисциплины, а также с разрешения преподавателя, проводящего зачет, справочной литературой и другими пособиями (учебниками, учебными пособиями, рекомендованной литературой и т.п.).

Время, предоставляемое студенту на подготовку к ответу на зачете, должно составлять не более 20 минут. По истечении данного времени студент должен быть готов к ответу.

Присутствие на зачете посторонних лиц (кроме лиц, осуществляющих проверку) без разрешения соответствующих лиц (ректора либо проректора по учебной и воспитательной работе, директора Школы, руководителя ОПОП или заведующего кафедрой), не допускается. Инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, не имеющие возможности самостоятельного передвижения, допускаются на зачет с сопровождающими.

При промежуточной аттестации обучающимся устанавливается оценка «зачтено» или «не зачтено».

В электронную ведомость студента вносится запись «зачтено» или «не зачтено». При неявке студента на зачет в электронной ведомости делается запись «не явился».

Вопросы к зачету

1. Цифровая трансформация промышленного предприятия. Стратегия цифровой трансформации. Оценка уровня автоматизации на производстве: ключевые показатели.
2. Интернет вещей. IoT и PoT. Управление данными с подключенных устройств.
3. Промышленная робототехника. FANUC. KUKA.
4. Большие данные. 5 V's больших данных. Технологии работы с большими данными.
5. AR и VR. Обучение, удаленная экспертиза, моделирование экспериментов и другие сферы применения AR и VR в химической промышленности и науке.
6. Химические базы данных. СУБД. Классификация баз данных.
7. Работа с БД: CRUD операции. Базы данных химических соединений: CAS Registry, PDB. Базы данных химических реакций: Reaxys.
8. Способы представления химических данных для последующей компьютерной обработки. Патентные базы данных.
9. Машинное обучение. Обучение с учителем.
10. Машинное обучение. Обучение без учителя.
11. Машинное обучение. Обучение с подкреплением.
12. Искусственный интеллект. Основные понятия и история возникновения.
13. Искусственный интеллект. Сильный и слабый искусственный интеллект. Способы представления знаний.
14. Искусственный интеллект. Основные классы задач интеллектуальной деятельности. Экспертные системы. Проект Dendral.

Критерии выставления оценки студенту на зачете

К зачету допускаются обучающиеся, выполнившие программу обучения по дисциплине, прошедшие все этапы текущей аттестации.

Оценка	Требования к сформированным компетенциям
«зачтено»	Студент показал развернутый ответ, представляющий собой связное, логическое, последовательное раскрытие поставленного вопроса, широкое знание литературы. Студент обнаружил понимание материала, обоснованность суждений, способность применить полученные знания на практике. Допускаются некоторые неточности в ответе, которые студент исправляет самостоятельно.
«не зачтено»	Студент обнаруживает незнание большей части проблем, связанных с изучением вопроса, допускает ошибки в ответе, искажает смысл текста, беспорядочно и неуверенно излагает материал. Данная оценка характеризует недостатки в подготовке студента, которые являются серьезным препятствием к успешной профессиональной и научной деятельности.

Оценочные средства для текущей аттестации

Текущая аттестация студентов по дисциплине проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Текущая аттестация проводится в форме контрольных мероприятий (собеседования/ устного опроса, реферата, проекта) по оцениванию фактических результатов обучения студентов и осуществляется ведущим преподавателем.

Объектами оценивания выступают:

- учебная дисциплина (активность на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий, посещаемость всех видов занятий по аттестуемой дисциплине);
- степень усвоения теоретических знаний;
- уровень овладения практическими умениями и навыками по всем видам учебной работы;
- результаты самостоятельной работы.

Составляется календарный план контрольных мероприятий по дисциплине. Оценка посещаемости, активности обучающихся на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий ведётся на основе журнала, который ведёт преподаватель в течение учебного семестра.

Вопросы для собеседования / устного опроса

Раздел 1. Цифровые технологии в химических производствах.

1. Какие сложности могут возникнуть на предприятии после внедрения базовых информационных систем?

Ответ: Разрозненность информации, существующей в ИТ-системах
Сложность интеграции систем с учетом постоянных обновлений. Низкая культура использования ИТ-систем

2. Какие системы обеспечивают надежный обмен производственными и технологическими данными между несколькими участками производства в режиме реального времени?

Ответ: MDC (Machine Data Collection), MES (Manufacturing Execution System).

3. Что необходимо учитывать при принятии управленческих решений в процессе внедрения технологий цифрового производства?

Ответ: Потенциальный эффект (достигаемый и измеримый) и законодательные и технологические ограничения.

4. Какие вопросы являются ключевыми на этапе оценки проекта-пилота?

Ответ: Целесообразно ли внедрение? Какие конкретные особенности пилотного проекта привели к его успеху или неудаче? Какие проекты или

подразделения на предприятии могли бы получить выгоду от использования данного цифрового решения?

5. Каков правильный порядок этапов работы с данными?

Ответ: 1 - сбор данных с датчиков; 2 - хранение данных; 3 - обработка данных; 4 - анализ данных.

6. Предприятие проинвестировало 30 млн. руб. в реализацию цифровой инициативы по созданию сервиса на базе производственных данных. Это принесло экономический эффект в размере 2 млн. руб. в месяц. Оцените срок окупаемости и ROI данного решения (в расчете на 3 года, без учета инфляции).

Ответ: 15 месяцев и 240%.

7. Дайте определение и расшифруйте, что стоит за каждым V понятия «5 V's of Big Data».

Ответ: «5 V's of Big Data» - это комплекс свойств, характеризующих большие данные: 1. Volume - количество собираемых данных; 2. Variety - разнообразие типов структурированных и неструктурированных данных; 3. Velocity - высокая скорость создания данных; 4. Veracity - степень доверия к полученным данным; 5. Value - бизнес-ценность, которую можно извлечь из данных (порядок не важен).

Раздел 2. Цифровые технологии в химии.

1. Кем и когда была разработана реляционная модель данных и на каком математическом аппарате она основаны?

Ответ: Реляционная модель данных была впервые разработана Коддом в 1970г. Она основана на использовании математического аппарата реляционного исчисления.

2. Проводя классификацию по типу информации, содержащейся в базе данных, на какие типы можно разделить химические базы данных (например, в соответствии с классификацией, предложенной Энгелом в *Engel, T. Databases and Data Sources in Chemistry // Chemoinformatics: A textbook / ed. by J. Gasteiger, T. Engel – Weinheim: Wiley-VCH, 2003 – p.227-290*)?

Ответ: Литературные БД (библиографические, полнотекстовые), фактографические БД (численные, мета-базы, каталожные, базы данных исследовательских проектов) и структурные БД (БД химических соединений, БД химических реакций, патентные БД) – основные типы химических баз данных согласно классификации Энгела.

3. Что означает акроним CRUD? Каким операторам манипуляции данными соответствуют функции CRUD в языке SQL?

Ответ: CRUD обозначает четыре базовые функции работы с данными: create (создать), read (читать), update (модифицировать), delete (удалить). В SQL

этим функциям соответствуют операторы Insert (создание записей), Select (чтение записей), Update (редактирование записей), Delete (удаление записей).

4. Дайте определение понятию «искусственный интеллект». Кто и когда впервые ввел данное понятие? Во время какого важного события в истории становления искусственного интеллекта как науки?

Ответ: Искусственный интеллект – это наука и технология создания интеллектуальных машин, особенно интеллектуальных компьютерных программ, умеющих выполнять функции, традиционно считавшиеся прерогативой человека. Термин «искусственный интеллект» впервые сформулировал Джон Маккарти в 1956 г. во время Дартмутского семинара пионеров в области AI (Марвин Мински, Клод Шеннон, Артур Самюэль, Аллен Ньюэлл, Герберт Саймон и др.), проведенного в Дартмутском колледже.

5. Объясните вкратце, чем отличаются друг от друга алгоритмы машинного обучения «обучение с учителем», «обучение без учителя» и «обучение с подкреплением».

Ответ: Тип машинного обучения «обучение с учителем» предполагает, что алгоритм обучается на уже имеющихся данных об объектах и правильных ответах. Тип машинного обучения «обучение без учителя» предполагает, что алгоритм для обучения не использует заранее данных ответов. Тип машинного обучения «обучение с подкреплением» предполагает, что алгоритм обучается в процессе взаимодействия со средой.

6. Какие три основные части программы Heuristic Dendral?

Ответ: Plan-Generate-Test

7. Назовите основные классы задач интеллектуальной деятельности, которые традиционно выделяют при разработке систем, основанных на знаниях.

Ответ: Основные классы задач интеллектуальной деятельности: 1) задачи классификации 2) задачи диагностики 3) задачи мониторинга 4) задачи планирования 5) задачи управления 6) задачи ремонта 7) задачи проектирования 8) задачи интерпретации 9) задачи прогноза.

Критерии оценивания

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент показал развернутый ответ на вопрос, знание литературы, обнаружил понимание материала, обоснованность суждений, неточности в ответе исправляет самостоятельно.
«не зачтено»	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.

Реферат (ПР-4)

Каждый студент выбирает один из вопросов практических занятий или его часть для написания реферата. При желании обучающийся может выбрать свой **вариант** темы, аналогичной теме практического занятия, для написания реферата. Оцениванию подвергается письменный текст реферата, оформленный в соответствии с ГОСТ 7.32-2002 «Отчет о научно-исследовательской работе» или методическими рекомендациями ДВФУ, и публичное выступление по теме реферата, сопровождаемое презентацией.

Тематика рефератов

1. Архитектура промышленного интернета вещей
2. Промышленные роботы KUKA.
3. Работа с БД: CRUD операции.
4. Базы данных химических соединений: CAS Registry, PDB.
5. и т.д.

Критерии оценивания реферата (ПР-4)

Критерии оценки текста реферата.

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, реферировать литературные источники; методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области. Реферат характеризуется смысловой цельностью, связностью и последовательностью изложения. Студент умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки.
«не зачтено»	Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Студент не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники. Реферат не выполнен.

Критерии оценки презентации

Оценка	2 балла (неудовлетворительно)	3 балла (удовлетворительно)	4 балла (хорошо)	5 баллов (отлично)
Критерии	Содержание критериев			

Раскрытие Проблемы	Проблема не раскрыта. Отсутствуют выводы	Проблема раскрыта не полностью. Выводы не сделаны и/или выводы не обоснованы	Проблема раскрыта. Проведен анализ проблемы без привлечения дополнительной литературы. Не все выводы сделаны и/или обоснованы	Проблема раскрыта полностью. Проведен анализ проблемы с привлечением дополнительной литературы. Выводы обоснованы
Представление	Представляемая информация логически не связана. Не использованы профессиональные термины. Отсутствует иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей	Представляемая информация не систематизирована и/или не последовательна. Использовано 1-2 профессиональных термина. Иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей заимствован	Представляемая информация не систематизирована и последовательна. Использовано более 2 профессиональных терминов. Представлен иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей	Представляемая информация систематизирована, последовательна и логически связана. Использовано более 5 профессиональных терминов. Представлен самостоятельно сделанный иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей
Оформление	Не использованы технологии Power Point. Больше 4 ошибок в представляемой информации	Использованы технологии Power Point частично. 3-4 ошибки в представляемой информации	Использованы технологии Power Point. Не более 2 ошибок в представляемой информации	Широко использованы технологии (Power Point и др.). Отсутствуют ошибки в представляемой информации
Ответы на вопросы	Нет ответов на вопросы	Только ответы на элементарные вопросы	Ответы на вопросы полные и/или частично полные	Ответы на вопросы полные, с приведением примеров и/или пояснений

Проект (ПР-9)

Каждый студент выбирает программное обеспечение (ПО), используемое для научных или инженерных задач в химии или химических производствах (например, одно из списка ниже «Тематика индивидуальных проектов»). Оцениванию подвергается письменный текст проекта, оформленный в соответствии с ГОСТ 7.32-2002 «Отчет о научно-исследовательской работе» или методическими рекомендациями ДВФУ, и публичное выступление по теме проекта, сопровождаемое презентацией.

Тематика индивидуальных проектов

1. КОМПАС 3D
2. ЯМР софт: Spin Works
3. «ES8» для потенциостатов
4. ChemLab
5. Honeywell UniSim Design
6. Gaussian
7. Origin
8. ACDLabs
9. Hysys
10. TopSpin 4.x.x для спектрометров ЯМР
11. PRIMUS для обработки спектров малоуглового рентгеновского рассеяния
12. ChemPen3D
13. ChemOffice
14. BATE
15. WinNormos для обработки мессбауэровских спектров
16. Discovery Studio (Dassault Systemes BIOVIA (formerly Accelrys))
17. GROMACS
18. NAMD
19. и т.д.

Критерии оценивания проекта (ПР-9)

Необходимые элементы проекта

Текст проекта о выбранном ПО должен включать следующие необходимые элементы:

- a. назначение ПО;
- b. основные функции ПО;
- c. атрибуты качества ПО;
- d. системные требования ПО;
- e. особенности пользовательского интерфейса ПО;
- f. решение с помощью описываемого ПО некоторой задачи (постановка задачи, входные данные задачи, выходные данные задачи, алгоритм решения задачи с использованием выбранного ПО);
- g. приложение (принтскрины графиков, диалоговых окон, элементов пользовательского интерфейса выбранного ПО).

Критерии оценки текста проекта.

Оценка	Требования
«зачтено»	В проекте присутствуют необходимые элементы. Студент владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, реферировать литературные источники; методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области. Проект характеризуется смысловой цельностью, связностью и последовательностью изложения. Студент умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки.
«не зачтено»	В проекте отсутствуют необходимые элементы. Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Студент не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники. Проект не выполнен.

Критерии оценки презентации

Оценка	2 балла (неудовлетворительно)	3 балла (удовлетворительно)	4 балла (хорошо)	5 баллов (отлично)
Критерии	Содержание критериев			
Раскрытие Проблемы	Проблема не раскрыта. Отсутствуют выводы	Проблема раскрыта не полностью. Выводы не сделаны и/или выводы не обоснованы	Проблема раскрыта. Проведен анализ проблемы без привлечения дополнительной литературы. Не все выводы сделаны и/или обоснованы	Проблема раскрыта полностью. Проведен анализ проблемы с привлечением дополнительной литературы. Выводы обоснованы

Представление	Представляемая информация логически не связана. Не использованы профессиональные термины. Отсутствует иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей	Представляемая информация не систематизирована и/или не последовательна. Использовано 1-2 профессиональных термина. Иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей заимствован	Представляемая информация не систематизирована и последовательна. Использовано более 2 профессиональных терминов. Представлен иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей	Представляемая информация систематизирована, последовательна и логически связана. Использовано более 5 профессиональных терминов. Представлен самостоятельно сделанный иллюстративный материал в виде блок-диаграмм, профилей
Оформление	Не использованы технологии Power Point. Больше 4 ошибок в представляемой информации	Использованы технологии Power Point частично. 3-4 ошибки в представляемой информации	Использованы технологии Power Point. Не более 2 ошибок в представляемой информации	Широко использованы технологии (Power Point и др.). Отсутствуют ошибки в представляемой информации
Ответы на вопросы	Нет ответов на вопросы	Только ответы на элементарные вопросы	Ответы на вопросы полные и/или частично полные	Ответы на вопросы полные, с приведением примеров и/или пояснений