

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Таскаев Сергей Васильевич  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 14.04.2026 16:07:17  
Уникальный идентификатор:  
04c19ed8bfb98f9b6cb77a48bb9ab78808922519



МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)	стр. 1
Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Вычислительные методы в химии» по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	

**Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации  
по дисциплине (модулю)**

Вычислительные методы в химии

Направление подготовки (специальность)  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)  
Фундаментальная и прикладная химия

Присваиваемая квалификация  
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения  
Очная

Год(ы) набора 2026

Челябинск 2026 г.



## Содержание

1. Паспорт фонда оценочных средств
2. Перечень формируемых компетенций
  - 2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной
3. Содержание оценочных средств по дисциплине
  - 3.1. Виды оценочных средств
  - 3.2. Содержание оценочных средств
4. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации
  - 4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации
  - 4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств
  - 4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций



## 1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Направление подготовки: *04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»*

Направленность (профиль) *Фундаментальная и прикладная химия*

Дисциплина: *Вычислительные методы в химии*

Семестр изучения: *4*

Формы промежуточной аттестации: *экзамен.*

Система оценивания: *оценивание результатов осуществляется в рамках 5-балльной системы.*

## 2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

### 2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Вычислительные методы в химии» направлено на формирование следующих компетенций:

Коды компетенции согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Содержание компетенций согласно ФГОС (ОПОП ВО)	Индикаторы достижения компетенции согласно ОПОП	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
1	2	3	4
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3.2 Умеет использовать современные компьютерные программы и базы данных для решения профессиональных задач;	<b>Знает</b> теоретические основы химического и математического моделирования; <b>Умеет</b> использовать современные компьютерные программы и базы данных для решения профессиональных задач; Способен ориентироваться в современных базах данных химической направленности;
ОПК-5	Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной	ОПК-5.2 Умеет использовать современное программное обеспечение с соблюдением правил информационной безопасности;	<b>Знает</b> принципы работы информационных технологий и требований информационной безопасности; <b>Умеет</b> использовать информационные базы данных и имеющиеся программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с соблюдением правил информационной безопасно-



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)

Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)  
«Вычислительные методы в химии»  
по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»  
направленности (профилю) Фундаментальная и прикладная химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 4

деятельности с учетом  
основных требований  
информационной  
безопасности

сти;  
**Владеет** навыками использо-  
вания основных типов  
программных продуктов для  
решения задач профессио-  
нальной деятельности.



### 3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

#### 3.1. Виды оценочных средств

Код, наименование компетенции согласно ФГОС	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине	Контролируемые темы/ разделы	Семестр	Номер задания	Наименование оценочного средства
ОПК-3	ОПК-3. Знает основные понятия теории вероятности и математической статистики, основы методов анализа численных данных;	Теория вероятности и математическая статистика	4	1–2	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) Отчет по лабораторной работе
ОПК-3 ОПК-5	ОПК-3. Знает теоретические основы химического и математического моделирования; ОПК-5. Умеет использовать информационные базы данных и имеющиеся программные продукты для расчета структурных характеристик молекул, их реакционной способности и др. свойств веществ с соблюдением правил информационной безопасности;	Математические методы	4	3–4	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом)
ОПК-3	ОПК-3. Умеет строить модели соединений в программах для трёхмерного моделирования, производить расчёт геометрических и топологических характеристик молекул с использованием современных компьютерных программ и профессиональных баз данных;	Химическая топология	4	5–6	Вопросы к экзамену (задания открытого типа с развернутым ответом) Домашнее задание Отчет по лабораторной работе
ОПК-3 ОПК-5	ОПК-3. Способен ориентироваться в совре-	QSAR	4	7–10	Вопросы к экзамену (задания



	менных базах данных химической направленности; ОПК-5. Владеет навыками использования основных типов программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности.				открытого типа с развернутым ответом) Отчет по лабораторной работе
--	---	--	--	--	---

Типовые задания, критерии и показатели оценивания в рамках текущего контроля представлены в рабочей программе дисциплины. Полные комплекты оценочных средств и контрольно-измерительных материалов хранятся на кафедре.

## 3.2. Содержание оценочных средств

### 3.2.1. Вопросы к экзамену по дисциплине (задания открытого типа с развернутым ответом)

1. Основы математической статистики (ОПК-3)  
*План ответа: динамические и статические случайные величины и их характеристики (мода, медиана, математическое ожидание, дисперсия). Статистические гипотезы: методы доказательства основных гипотез.*
2. Регрессионный анализ (ОПК-3)  
*План ответа: определение, уравнение регрессии, факторы, параметры, отклик. Метод наименьших квадратов. Решение уравнения МНК в матричной форме.*
3. Экспертные системы (ОПК-3, ОПК-5)  
*План ответа: логические, логико-статистические экспертные системы, логико-статистические системы с «нечёткой логикой». Способы построения и основные отличия видов экспертных систем.*
4. Методы классификации (ОПК-3, ОПК-5)  
*План ответа: преобразование пространства с помощью метода главных компонент. Дискриминантный анализ.*
5. Алгоритмы распознавания образов (ОПК-3)  
*План ответа: метод k ближайших соседей, алгоритм «голосования». Метод потенциальных функций и построения разделяющей гиперповерхности. Алгоритм Айдарханова.*
6. Алгоритмы распознавания образов (ОПК-3)  
*План ответа: метод Главных компонент. Формирование матриц расстояний, определение осей нового пространства. Информационные веса объектов и факторов. Алгоритм «идеального эталона».*
7. Методы QSAR (ОПК-3, ОПК-5)  
*План ответа: происхождение формализма QSAR. Классификация методов CADD. Современные алгоритмы 3D и 4D QSAR: методы HASL и CoMFA.*
8. Способы расчёта линейных геометрических характеристик (ОПК-3, ОПК-5)



*План ответа: линейные характеристики: главные вращательные инварианты и метод главных компонент. Квадратичные и объёмные характеристики: сеточные модели и алгоритмы Коннолли.*

9. Способы расчёта квадратичных и объёмных геометрических характеристик (ОПК-3, ОПК-5)

*План ответа: квадратичные и объёмные характеристики: сеточные модели и алгоритмы Коннолли.*

10. Способы расчёта безразмерных геометрических характеристик (ОПК-3, ОПК-5)

*План ответа: безразмерные характеристики: пропорции, характеристики симметрии и хиральности. Теоремы о расположении элементов симметрии. Элементы хиральности. Хиральные симплексы. Негативный критерий хиральности.*

### **3.2.2. Пример домашнего задания (задание открытого типа с развернутым ответом) по теме «Химическая топология»**

Для предложенных соединений (циклические, конденсированные углеводороды) постройте матрицу расстояний и рассчитайте следующие топологические индексы: число вершин ( $N$ ), число рёбер ( $m$ ), индекс Винера ( $W$ ), индексы  $N_2$   $N_3$ , индекс Балабана ( $B$ ), 1й и 2й индексы Загребской группы ( $M_1$ ,  $M_2$ ), индекс сравнимости ( $M_3$ ), энтропию Шеннона ( $S$ ), индекс Платта ( $P$ ), индекс Рандича ( $\chi_1$ ). Рёбрами считаются все связи кроме C–H!

Домашнее задание считается выполненным при условии не менее 70% правильных ответов.

### **3.2.3. Отчет по лабораторной работе (задание открытого типа с развернутым ответом)**

#### **Темы лабораторных работ:**

1. Регрессионный анализ. Построение корреляций «структура–свойство».
2. Интерпретация полученных регрессионных моделей.
3. Расчёт топологических индексов. Ручной расчёт заданного набора топологических индексов.
4. Моделирование структур. Построение трёхмерных структур исследуемых соединений.
5. Расчёт объёма и площади исследуемых молекул. Расчёт геометрических характеристик с использованием методов QSAR.

Студенту на выбор предоставляется 30 объектов (органические молекулы различной структуры: циклические, ациклические, в том числе гомологи), которые обсчитываются в ходе 5 лабораторных работ. Полученные результаты по выбранным объектам оформляются в виде общего отчета. Отчёт должен быть оформлен соответствующим образом (иметь заданную структуру): - титульный лист; - общая характеристика объектов исследования с приведением структур исследуемых соединений. Указываются экспериментальные (геометрические) и теоретические (топологические индексы) характеристики; - описание хода выполнения работы; - обработка результатов с построением линейных регрессионных моделей; - выводы. В выводах даётся интерпретация наилучшей полученной модели.



## 4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

К сдаче экзамена допускаются студенты, успешно защитившие отчёт по результатам практических занятий. Отчет должен иметь заданную структуру и оформление, выполнен в срок, выводы логичны и обоснованы. В противном случае для получения допуска к экзамену необходимо решить две задачи, аналогичные домашнему заданию.

Экзамен проводится в письменной форме по билетам, каждый из которых содержит один теоретический вопрос и одну задачу на расчёт топологических индексов. На подготовку ответа отводится не более 90 мин. После просмотра ответа преподавателем следует устный опрос. Критерии оценивания приведены в табл. 4.1.

Выполнение домашнего задания и отчета по лабораторным работам предусматривает использование ПК. Подготовка ответа на экзамене не предусматривает использования дополнительного оборудования и материалов.

### 4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

#### 4.2.1. Критерии оценивания ответа на экзамене

Таблица 4.1.

Отлично	Хорошо	Удовлетворительно	Неудовлетворительно
Высокий уровень освоения проверяемых компетенций	Средний уровень освоения проверяемых компетенций	Базовый уровень освоения проверяемых компетенций	Недостаточный уровень освоения проверяемых компетенций
Обучающийся показал глубокое знание учебно-программного материала. Исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически-стройно его изложил. Смог самостоятельно сделать необходи-	Обучающийся знает учебно-программный материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос. Может правильно	Обучающийся освоил основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, Владеет отдельными приемами саморегуляции, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывая	Обучающийся не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях.



мые обобщения и выводы. В соответствии с картой компетенций демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности.	применить теоретические положения и владеет необходимыми навыками при выполнении практических задач.	конкретные условия и свои возможности при принятии решений.	
---	--	---	--

Особенности проведения процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья обозначены в рабочей программе дисциплины (модуля).

### **4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций**

Уровни сформированности компетенций определяются следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке «Отлично» и предполагает:
  - формирование навыков работы с современными программными продуктами для моделирования структур и расчёта свойств органических молекул;
  - формирование навыков работы с современными программными продуктами для проведения статистической обработки результатов исследования;
  - способность аргументировать собственную точку зрения, решать ситуационные задачи, критически оценивать информацию о способах использования математических методов в химии.
2. Средний уровень соответствует оценке «Хорошо» и предполагает:
  - формирование навыков работы с современными программными продуктами для моделирования структур и расчёта свойств органических молекул;
  - формирование навыков сбора, анализа и обработки данных, необходимых для решения ситуационных задач;



- студент способен давать развернутые ответы на теоретические вопросы дисциплины на уровне не ниже оценки «Удовлетворительно».
3. Базовый уровень соответствует оценке «Удовлетворительно» и предполагает:
- формирование компетенций на начальном уровне: владение понятийным аппаратом; умение пользоваться отдельными программными продуктами для моделирования параметров молекул;
  - удовлетворительные навыки анализа и обработки экспериментальных данных.
4. Недостаточный уровень (бессистемные разрозненные знания, отсутствие навыков анализа и обработки экспериментальных данных) соответствует оценке «Неудовлетворительно».

