

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Гаскаев Сергей Валерьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.09.2025 10:37:41
Уникальный программный ключ:
04c19ed8bfb987566c677a486b9a6788b8322319



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

Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) «Численные методы в химии», по направлению подготовки (специальности) 04.03.01 "Химия", направленности (профилю) Аналитическая химия и химическая экспертиза ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1
---	--------

**Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации
по дисциплине (модулю)
Численные методы в химии**

**Направление подготовки (специальность)
04.03.01 – Химия**

**Направленность (профиль)
Аналитическая химия и химическая экспертиза**

**Присваиваемая квалификация (степень)
Бакалавр**

**Форма обучения
Очная**

Год(ы) набора 2025

Челябинск 2025 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: 04.03.01 «Химия»

Направленность (профиль) Аналитическая химия и химическая экспертиза

Дисциплина: Численные методы в химии

Семестр (семестры) изучения: 4.

Форма (формы) промежуточной аттестации: 4 семестр – зачет, экзамен.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ФОРМИРУЕМЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

2.1. Компетенции, закреплённые за дисциплиной

Изучение дисциплины «Численные 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 с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3-2. Умеет использовать современные компьютерные программы и базы данных для решения профессиональных задач;	Знать: Для достижения индикатора ОПК-3.2 знать: теоретические основы химического и математического моделирования Уметь: Для достижения индикатора ОПК-3.2 уметь: использовать современные компьютерные программы и базы данных для решения профессиональных задач; Владеть: Для достижения индикатора ОПК-3.2 способен ориентироваться в современных базах данных химической направленности.
ОПК-5	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач	У К - 5 . 2 . Демонстрирует умение понимать и толерантно воспринимать культурное многообразие	Знать: Для достижения индикатора ОПК-5.2 знать: принципы работы информационных технологий и требований информационной безопасности;



	профессиональной деятельности	общества в социально-историческом, этическом философском контекстах.	и	Уметь: Для достижения индикатора ОПК-5.2 уметь: использовать информационные базы данных и имеющиеся программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с соблюдением правил информационной безопасности; Владеть: Для достижения индикатора ОПК-5.2 владеть: навыками использования основных типов программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности
--	-------------------------------	--	---	---



3. СОДЕРЖАНИЕ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1 Виды оценочных средств

№ п/п	Код компетенции/ планируемые результаты обучения	Контролируемые темы/ разделы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Наименование оценочного средства на промежуточной аттестации/№ задания
1	ОПК-3,ОПК-5	Теория вероятностей и математическая статистика	Отчет по практической работе Вопросы к домашней работе	Вопросы к экзамену
2	ОПК-3,ОПК-5	Математические методы	Отчет по практической работе Вопросы к домашней работе	Вопросы к экзамену
3	ОПК-3,ОПК-5	Химическая топология	Отчет по практической работе Вопросы к домашней работе	Вопросы к экзамену
4	ОПК-3,ОПК-5	QSAR	Отчет по практической работе Вопросы к домашней работе	Вопросы к экзамену



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

3.2 Содержание оценочных средств

Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации:

Примерное домашнее задание и практическое задание для контроля качества усвоения темы «Химическая топология»

Для предложенных соединений 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 (χ_1).

Рёбрами считаются все связи кроме C–H!

Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Примерные вопросы к экзамену:

1. Основы математической статистики: динамические и статические случайные величины и их характеристики (мода, медиана, математическое ожидание, дисперсия). Статистические гипотезы: методы доказательства основных гипотез.
2. Регрессионный анализ: определение, уравнение регрессии, факторы, параметры, отклик. Метод наименьших квадратов. Решение уравнения МНК в матричной форме.
3. Экспертные системы (логические, логико-статистические, логико-статистические с «нечёткой логикой»). Способы построения и основные отличия видов экспертных систем.
4. Методы классификации: преобразование пространства с помощью метода главных компонент. Дискриминантный анализ.
5. Алгоритмы распознавания образов: метод k ближайших соседей, алгоритм «голосования». Метод потенциальных функций и построения разделяющей гиперповерхности. Алгоритм Айдарханова.
6. Алгоритмы распознавания образов: метод Главных компонент. Формирование матриц расстояний, определение осей нового пространства. Информационные веса объектов и факторов. Алгоритм «идеального эталона».
7. Методы QSAR. Происхождение формализма QSAR. Классификация методов CADD. Современные алгоритмы 3D и 4D QSAR: методы HASL и CoMFA.
8. Способы расчёта геометрических характеристик. Линейные характеристики: главные вращательные инварианты и метод главных компонент.
9. Способы расчёта геометрических характеристик. Квадратичные и объёмные характеристики: сеточные модели и алгоритмы Коннолли.
10. Способы расчёта геометрических характеристик. Безразмерные характеристики: пропорции, характеристики симметрии и хиральности. Теоремы о расположении элементов симметрии. Элементы хиральности. Хиральные семплексы. Негативный критерий хиральности.



4. ПОРЯДОК ПРОВЕДЕНИЯ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1. Порядок проведения промежуточной аттестации

Критерием успешности освоения учебного материала является экспертная оценка преподавателя, учитывающая регулярность посещения обязательных учебных занятий, знаний теоретического раздела программы по дисциплине, практическим занятиям.

Качество усвоения знаний завершается зачетом.

Экзамен проводится в присутствии преподавателя и предполагает развернутый, полный ответ на дватеоретических вопроса. Вопросы составляются с учётом материала, пройденного как на лекционных занятиях, так и на практических занятиях. Время, отводимое на выполнение итоговой работы 60 минут. Экзамен ориентирован на выявление уровня сформированности знаний, умений и навыков, составляющих основу профессиональных компетенций, обеспечиваемых учебной дисциплиной.

4.2. Критерии оценивания промежуточной аттестации по видам оценочных средств

4.2.1. Критерии оценивания

Критерии оценивания домашней работы:

1. Полнота изложения и раскрытие содержания вопроса.
2. Ясность формулировок.
3. Соответствие общепринятым положениям, формулировкам и понятиям в науке.

Критерии оценивания отчета по практическим занятиям:

Отчёт считается защищённым, если оформлен правильно и имеющиеся выводы логичны и обоснованы. Сданный в срок отчёт даёт допуск к экзамену. В противном случае для получения допуска к экзамену необходимо решить две задачи, аналогичные домашнему заданию.

Критерии оценивания ответа на экзамене:

Оценка "отлично" - Студент показал глубокое знание учебно-программного материала. Исчерпывающе, последовательно, грамотно и логически-стройно его изложил. Смог самостоятельно сделать необходимые обобщения и выводы. В соответствии с картой компетенций демонстрирует обоснованный выбор приемов саморегуляции при выполнении деятельности в условиях неопределенности.

Оценка "хорошо" - Студент знает учебно-программный материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает



существенных неточностей в ответе на вопрос. Может правильно применить теоретические положения и владеет необходимыми навыками при выполнении практических задач. Демонстрирует возможность и обоснованность реализации приемов саморегуляции при выполнении деятельности в конкретных заданных условиях.

Оценка "удовлетворительно" - Студент освоил основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, Он владеет отдельными приемами саморегуляции, но допускает существенные ошибки при их реализации, не учитывая конкретные условия и свои возможности при принятии решений.

Оценка "неудовлетворительно" - Студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, владеет информацией об отдельных приемах саморегуляции, но не умеет реализовывать их в конкретных ситуациях.

4.3 Критерии оценивания зачета

Зачтено	Не зачтено
Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины.	Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

4.3. Результаты промежуточной аттестации и уровни сформированности компетенций

При подведении итогов учитываются результаты текущей аттестации.

Уровни сформированности компетенций определяется следующим образом:

1. Высокий уровень сформированности компетенций соответствует оценке
↕ ФГБОУ ВО



ОТЛИЧНО:

- предполагает формирование компетенций на высоком уровне, готовность к самостоятельной профессиональной деятельности: формируются навыки планирования и проведения химического анализа, навыки систематизации теоретических, расчетных и экспериментальных данных для решения профессиональных задач.
 - студент способен аргументировать собственную точку зрения по решению профессиональных вопросов, критически оценивать информацию, формулировать собственные выводы.
2. Средний уровень соответствует оценке хорошо:
- предполагает формирование компетенций на более высоком уровне: формируется комплексное знание планирования и проведения химического анализа, умение сбора, анализа и обработки данных, необходимых для решения профессиональных задач;
 - студент способен давать развернутые ответы на теоретические вопросы дисциплины на уровне не ниже оценки «удовлетворительно».
3. Базовый уровень соответствует оценке удовлетворительно:

