

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 20.05.2024 14:12:10 Уникальный программный ключ: 891954b8c2cf7b6350cbe51cdda3096e877fa1f3	МИНОВЕРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)	Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1
--	--	---	--------

Рабочая программа дисциплины (модуля)*

Вычислительные методы в химии

Направление подготовки (специальность)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

Органическая и биоорганическая химия

Присваиваемая квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии.

Форма обучения

очная

Год(ы) набора 2024

*Рабочая программа дисциплины (модуля) адаптирована для инклюзивного обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Челябинск 2024 г.



Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля)
5. Структура и содержание дисциплины (модуля)
6. Фонд оценочных средств
 - 6.1. Перечень видов оценочных средств
 - 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации
 - 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации
 - 6.4. Критерии оценивания
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)
 - 7.1. Рекомендуемая литература
 - 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"
 - 7.3. Перечень информационных технологий
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Специальные условия освоения дисциплины обучающимися с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья



1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью преподавания дисциплины является изучение численных методов вычисления как инструмента при решении конкретных задач, возникающих в рамках фундаментальной и прикладной химии, что позволит формировать у студентов устойчивые навыки их использования, закрепить когнитивные связи в цепочке: постановка химической задачи - математическая формулировка задачи (математическое моделирование) – выбор методов решения – реализация решения с помощью стандартного программного обеспечения (ПО) – интерпретация (визуализация) полученных результатов.

Результаты обучения по дисциплине направлены на достижение индикаторов:

ОПК-3-2. Умеет использовать современные компьютерные программы и базы данных для решения профессиональных задач;

ОПК-5-2. Умеет использовать современное программное обеспечение с соблюдением правил информационной безопасности;

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Цикл (раздел) ОПОП: К.М.01.04

2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Для освоения данной дисциплины студенты должны обладать знаниями, предполагаемые образовательной программой подготовки специалиста по таким базовым дисциплинам, как "Математика", "Информатика", "Неорганическая химия".

Математика

Информатика

Общая и неорганическая химия

2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Стереохимия и конформационный анализ

Теоретические основы органической химии

Квантовая химия

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

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 информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности

Знать:

Для достижения индикатора ОПК-5.2 знать: принципы работы информационных технологий и требований информационной безопасности;

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;



Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 4

Владеть:

Для достижения индикатора ОПК-5.2 владеть: навыками использования основных типов программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1 Знать:	
3.1.1	теоретические основы химического и математического моделирования; основные понятия теории вероятности и математической статистики, методы анализа численных данных;
3.2 Уметь:	
3.2.1	строить модели соединений в программах для трёхмерного моделирования;
3.2.2	производить расчёт геометрических и топологических характеристик молекул с использованием современных компьютерных программ и баз данных;
3.3 Владеть:	
3.3.1	навыками применения расчетно-теоретических методов для расчета структурных характеристик молекул, их реакционной способности и других свойств веществ с использованием современного программного обеспечения и баз данных профессионального назначения с соблюдением требований информационной безопасности.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану : 144 в том числе : аудиторные занятия : 72 самостоятельная работа : 6,6 часов на контроль : 54 контактная работа: 83,4 ИКР: 0	Виды контроля в семестрах: экзамены 4

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература
Раздел 1. Теория вероятностей и математическая статистика				
1.1	Основные понятия теории вероятностей и математической статистики Случайные величины, классификация случайных величин. Статистические гипотезы и способы их доказательства. /Лек/	4	2	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
1.2	Регрессионный анализ Уравнение регрессии, понятие функции отклика. Построение линейных регрессионных моделей в N-мерном пространстве. /Лек/	4	1	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
1.3	Регрессионный анализ Построение корреляций структура – свойство. /Лаб/	4	4	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
1.4	Защита отчёта Интерпретация полученных регрессионных моделей. /Лаб/	4	4	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
1.5	Консультации при написании отчёта /КонтАт/	4	6	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 2. Математические методы				
2.1	Экспертные системы Использование логических, логико-статистических и логико-статистических систем с «нечёткой логикой» для анализа и прогноза биологической активности. /Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4



Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности)
04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая
химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 5

2.2	Преобразование пространства по методу главных компонент /Лек/	4	1,5	Л1.1 Л1.2Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.3	Дискриминантный анализ /Лек/	4	0,5	Л1.1 Л1.2Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.4	Алгоритмы распознавания образов Метод k ближайших соседей, алгоритм «голосования», метод потенциальных функций и построения разделяющей гиперповерхности, алгоритм Айдарханова, метод Главных компонент, алгоритм «идеального эталона». Использование алгоритмов распознавания образов в задачах классификации биологически активных соединений. /Лек/	4	6	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
2.5	Численные методы Аналитическое дифференцирование. /Лек/	4	1	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
2.6	Численные методы Численное интегрирование: метод трапеций, формула Симпсона, квадратуры Гаусса-Лежандра. /Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 3. Химическая топология				
3.1	Введение в химическую топологию Теория графов. Понятие графа, классификация графов. Молекулярный граф. Топологические индексы. Алгебраическое описание графа – топологические матрицы расстояний и смежности. /Лек/	4	4	Л1.1Л2.2 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
3.2	Расчёт топологических индексов Ручной расчёт заданного набора топологических индексов. /Лаб/	4	20	Л1.1Л2.2 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
3.3	Консультации при решении задач /КонтАт/	4	5,4	Л1.1Л2.2 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
3.4	Пространственное строение соединений углерода Расположение заместителей у sp ³ -, sp ² - и sp-гибридизованного атома углерода. Пространственное строение малых и средних циклов. Строение ароматических соединений. /Ср/	4	6,6	Л1.1Л2.2 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 4. QSAR				
4.1	QSAR Этапы создания лекарственных средств. Концепции фармакофоров и скаффолдов. Комбинаторный синтез. Проблема QSAR. Универсальная классификация стадий действия лекарственных средств и классификация характеристик лекарственных средств К.Ханша. Методы QSAR. CADD. Классификация методов. Современные методы 3D-QSAR. Алгоритмы HASL и CoMFA. Алгоритм PARM. /Лек/	4	8	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
4.2	Расчёт геометрических характеристик молекул Линейные характеристики: расчёт по методу главных вращательных инвариантов и методу главных компонент. Квадратичные геометрические характеристики: расчёт площадей сечений, расчёт площади поверхности с использованием сеточных моделей и алгоритма М. Коннолли. Объёмные геометрические характеристики: сеточные модели, их модификации и алгоритм Коннолли. Характеристики симметрии: элементы симметрии, численное выражение симметрии относительно различных элементов, теоремы о расположении элементов симметрии. Характеристики хиральности: виды хиральности, хиральные семплексы и негативный критерий хиральности. /Лек/	4	6	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4



Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности)
04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая
химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 6

4.3	Моделирование структур Построение трёхмерных структур исследуемых соединений. /Лаб/	4	4	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
4.4	Расчёт объёма и площади исследуемых молекул Расчёт геометрических характеристик с использованием методов QSAR. /Лаб/	4	4	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

6.1. Перечень видов оценочных средств

Отчет по практической работе
Вопросы к домашней работе
Вопросы к экзамену

6.2. 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 N2 N3, индекс Балабана (B), 1й и 2й индексы Загребской группы (M1, M2), индекс сравнимости (M3), энтропию Шеннона (S), индекс Платта (P), индекс Рандича (χ_1).

Рёбрами считаются все связи кроме C–H!

6.3. 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.

6.4. 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:



Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 7

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.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1. Рекомендуемая литература

7.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л1.1	Белик А. В.	Современные элементы вычислительной химии: монография	Челябинск: Издательство Челябинского государственного о университета, 2013	
Л1.2	Дерр В. Я.	Теория вероятностей и математическая статистика: учебное пособие для вузов (https://e.lanbook.com/book/159475)	Санкт- Петербург : Лань, 2021	ЭБС

7.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.1	Барский А. Б.	Логические нейронные сети: учебное пособие (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232983)	Москва : Интернет- Университет Информационны х Технологий (ИНТУИТ) Бином. Лаборатория знаний, 2007	ЭБС
Л2.2	Белик А. В.	Вычислительные методы в химии. Задачи классификации: учебное пособие (http://library.csu.ru/rbooks2/view2?code=local/007769/belikav)	Челябинск : Издательство Челябинского государственного о университета, 2014	ЭБС
Л2.3	Вапник В. Н., Червоненкис А. Я.	Теория распознавания образов: Статистические проблемы обучения	Москва : Наука, 1974	



Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 8

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.4	Меррифилид Р., Вобла Д., Симмонс Х., Кинг Р., Глуховцев М. Н.	Химические приложения топологии и теории графов	Москва : Мир, 1987	
Л2.5	Зефилов Н. С., Кучанов С. И.	Применение теории графов в химии: [сборник статей]	Новосибирск : Наука, Сибирское отделение, 1988	

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Университетская библиотека ONLINE: электронно-библиотечная система (ЭБС) / ООО Директмедиа Паблишинг. – Москва, 2010 – . – URL: http://biblioclub.ru/ . – Режим доступа : Доступ к полным текстам с любого компьютера, после регистрации из сети ЧелГУ. – Текст : электронный
Э2	Лань : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Лань. – Санкт- Петербург, 2011 – . – URL: http://e.lanbook.com/ . – режим доступа: Доступ к полным текстам с любого компьютера, после регистрации из сети ЧелГУ. – Текст : электронный
Э3	eLIBRARY.RU : научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000 – . – URL: http://elibrary.ru . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный
Э4	Юрайт : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Юрайт. – URL: http://urait.ru . –Режим доступа: Доступ к полным текстам с любого компьютера, после регистрации из сети ЧелГУ. – Текст : электронный

7.3 Перечень информационных технологий

7.3.1 Программное обеспечение

MS Office365

LMS Moodle

Adobe Reader

Avogadro

7.3.2 Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы

1. Электронный каталог научной библиотеки ЧелГУ [Электронный ресурс]: база данных / Челяб. гос. ун-т. - Челябинск, 1992 - .
2. Национальная электронная библиотека (НЭБ) (<https://rusneb.ru/>) Национальная электронная библиотека (НЭБ) : объединенный электронный каталог фондов российских библиотек : сайт. – URL: <http://нэб.рф>. – Режим доступа: из читальных залов библиотеки ЧелГУ. – Текст : электронный.
3. Президентская библиотека (<https://www.prlib.ru/>) Президентская библиотека : электронная национальная библиотека : сайт / ФГБУ Президентская библиотéка имени Б. Н. Ёльцина. – СанктПетербург, 2009 – . – URL: <https://www.prlib.ru/>. – Текст : электронный.
4. Web of Science (<https://apps.webofknowledge.com>) Web of Science : мультидисциплинарная реферативная база данных / компания Thomson Reuters. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.
5. Scopus (<https://www.scopus.com>) Scopus : реферативная база данных / Elsevier BV. – URL: <http://www.scopus.com/>. – Яз. англ. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения: доска, парты, мультимедийное и аудиооборудование.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно- наглядных пособий: Периодическая таблица Д.И. Менделеева, набор презентаций к лекциям по дисциплине; а также используется переносное и/или стационарное мультимедийное оборудование (экран, ноутбук, проектор, колонки).

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:

Основное оборудование:



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

Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 9

Учебная мебель на 62 посадочных места, стол преподавателя, стул преподавателя, доска ученическая обычная настенная. мультимедийное интерактивное оборудование: Проектор: Epson EB-965H. Экран: Моторизованный Seha. Ширина 173 см, формат 1:1. Акустическая система: 4 пассивные колонки ApartMask 6, пульт микшерный Behringer XENYX 1204USB, усилитель мощности Yamaha P2500S, микрофон AKG CGN99 H/S. Коммутация: Трибуна с ПК.

Программное обеспечение:

Операционная система Windows 7, лицензии бессрочные, договор АЭ/12/16 от 11.05.2016, Пакет офисных программ Microsoft Office 2016, лицензии бессрочные, АЭ/12/16 от 11.05.2016, Антивирусное программное обеспечение «Антивирус Касперского», лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2017.

Учебная аудитория для проведения лабораторных занятий: компьютерный класс

Основное оборудование:

6 автоматизированных рабочих мест ПК INTEL E 2140 ФОРМОЗА МОНИТОР TFT 17" Acer 1716 Fs (700;1.5ms, 1280x1024), компьютер для работ с деловыми и аналитическими программами Монитор TFT17"LGL1718S, интерактивная доска SMARTBoard 660 диагональ 64"/162/6см/New, проектор EPSON EB-X41, акустическая система 2.0 Sven SPS-678, 1 автоматизированное место сист. Блок СВТ 3.2/2/500.(корпус: Midi-TowerATX, мощность 450Вт, процессор - кол-во ядер-2, тактовая частота 3200 МГц, опер.память 1333 МГц, 2 Гб. жест. диск: SATAПобъем 500 Gb 7200 rpm. клавиатура, мышь, монитор AsusTFT19"VH198D, 5 автоматизированных рабочих мест ПК Системный блок: процессор 2-ух ядерный, макс. Базовая тактовая частота: 3500 МГц, операт. память 8 Гб, тип: DDR4, объем накопителя: 1000 Гб, Монитор 23", клавиатура, мышь, сетевой фильтр 5 роз., кондиционер.

Помещение для самостоятельной работы: Читальный зал № 1

Основное оборудование:

Количество посадочных мест – 50, 5 персональных компьютеров с подключением в сеть «Интернет», неограниченный доступ к ЭБС и БД, учебная мебель, кондиционер.

Программное обеспечение:

Microsoft Windows 10 Pro. (Лицензии бессрочные. Договор № АЭ-223/28/18), Microsoft Office 2016 Pro (Лицензии бессрочные. Договор № АЭ-223/28/18), Консультант Плюс (Соглашение о сотрудничестве № 31 от 20.05.2003 с региональным информационным центром общероссийской сети распространения правовой информации),

ПО «Антивирус Касперского» (Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2017 г.).

Помещение для самостоятельной работы: Информационно-библиографический отдел.

Основное оборудование:

Количество посадочных мест – 24, учебная мебель, 7 персональных компьютеров с подключением в сеть «Интернет», неограниченный доступ к ЭБС и БД.

Программное обеспечение:

Microsoft Windows Professional 7 Russian Academic OPEN No Level (СВТ(ОАОЦЕНТР) 18.02.10. Номер лицензии 46536280), Microsoft Windows Professional 7 Russian Academic OPEN No Level (Договор № АЭ-61/10), Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level (Договор № АЭ-23/12, номер лицензии 60411804), Консультант Плюс (Соглашение о сотрудничестве № 31 от 20.05.2003 с региональным информационным центром общероссийской сети распространения правовой информации) НЭБ (Договор № 101/НЭБ/2810 от 20.02.2018), ПО «Антивирус Касперского» (Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2017 г.)

Или иные, удобные для обучающегося, помещения для самостоятельной работы с компьютерной техникой и с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно- образовательную среду университета.

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Методические рекомендации студенту:

Основными видами самостоятельной работы студентов являются: работа с бумажными источниками информации (конспектом, книгой, методическими указаниями), работа с источниками сети Интернет и теми программными продуктами, которые рекомендованы преподавателем.

Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой дисциплины равномерно в течение всего семестра. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей темы не усвоен.

Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце книги.



При изучении материала по конспектам лекций следует обращать внимание на приводимые в лекциях ссылки сети Интернет. Студенту следует больше «экспериментировать» с ними, изучать справочную систему, различные возможности и сервисы соответствующих сайтов. Особое внимание необходимо уделять англоязычным ресурсам, поскольку подавляющее большинство научной информации публикуется на английском языке. При знакомстве с подобными ресурсами не следует «бояться» английского языка, при наличии затруднений желательнее пользоваться онлайн переводчиками и/или словарями. Перед осуществлением любого поиска информации следует тщательно продумывать стратегию: внимательно подходить к выбору ключевых слов, заранее продумывать их логические комбинации, знакомиться со справочной системой того или иного инструмента поиска и т.д. В процессе поиска необходимо обращать внимание на релевантность выдаваемых в процессе поиска документов. При поиске информации в реферативных базах данных желательнее запоминать/записывать фамилии авторов работающих по интересующей студента тематике и осуществлять поиск других работ данных авторов. После каждого поиска необходимо детально фиксировать информацию о найденных документах (указывать когда искали, где искали, какие ключевые слова использовали и т.д.).

Методические рекомендации к отчету по практическому заданию:

Результаты, полученные в ходе всех пяти занятий, описываются одним отчётом. 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.

К сдаче экзамена допускаются студенты, успешно защитившие отчёт по результатам практических занятий. В экзаменационном билете представлен один теоретический вопрос и одна задача на расчёт топологических индексов.

В случае применения при обучении дисциплины электронного обучения, дистанционных образовательных технологий общение обучающихся и преподавателя осуществляется в режиме как реального (программа Microsoft Teams), так и отложенного времени (система дистанционного обучения Moodle, электронная почта).

Большую часть времени обучающиеся самостоятельно работают с учебно-методическими материалами. Студенты имеют возможность консультироваться с преподавателем по всем вопросам, возникающим в ходе самостоятельной работы посредством электронной почты, сообщений в Moodle.

Доступ обучающегося к учебным ресурсам в режиме отложенного времени, самостоятельной работы осуществляется через сеть Интернет в удобном для него месте, времени и темпе.

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья электронное обучение (ЭО), дистанционные образовательные технологии (ДОТ) предусматривают возможность приема-передачи информации в доступных для них формах.

Реализация дисциплины с применением ЭО и ДОТ осуществляется на основании «Положения о реализации основных и дополнительных образовательных программ с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Челябинский государственный университет», «Положения о порядке зачета обучающимися по основным профессиональным образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «ЧелГУ» результатов освоения в организациях, осуществляющих образовательную деятельность, учебных предметов, курсов, дисциплин (модулей), практик, дополнительных образовательных программ» посредством электронной информационно-образовательной среды ФГБОУ ВО «ЧелГУ».

В исключительных случаях (форс-мажор и т.п.) при реализации образовательной деятельности с применением ЭО, ДОТ могут применять компоненты, не входящие в перечень электронной информационно-образовательной среды.

10. СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ОБУЧАЮЩИМИСЯ С ИНВАЛИДНОСТЬЮ И ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием специальных технических средств и голо информационных технологий, предоставляемых Ресурсным учебно-методическим центром по обучению инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ЧелГУ по запросу обучающегося.

1. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями зрения: портативный компьютер с вводом/выводом шрифтом Брайля с синтезатором речи «E1Braille-W14J G2»; ноутбуки с программной экранного доступа NVDA; электронные увеличители для удаленного просмотра; видеувеличители портативные; тифлоплеер; цифровые диктофоны.



2. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями слуха: система свободного звукового поля со встроенной совместимостью с FM-устройствами; радиоклассы «Сонет-PCM» с передатчиком, заушным индуктором и индукционной петлей; система информационная для слабослышащих переносная «Исток» А2 со встроенным плеером – звуковым информатором; документ-камера; программируемые слуховые аппараты индивидуального пользования.

3. Ассистивные информационные технологии: программное обеспечение экранного доступа с синтезом речи NVDA; программы экранного увеличения; программы речевого синтеза для компьютеров и ноутбуков; программы речевого синтеза для мобильных устройств; экранная клавиатура; экранная лупа.

При необходимости для обучающихся с нарушениями зрения на рабочих местах для проведения практических или лабораторных занятий устанавливается специальное программное обеспечение (программа речевой навигации NVDA, речевые синтезаторы, экранные лупы).

В учебные аудитории обеспечивается беспрепятственный доступ для обучающихся инвалидов и обучающихся с ограниченными возможностями здоровья. В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, предусматривается соответствующее количество мест для обучающихся с учетом нарушений их здоровья.

Для освоения дисциплины инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется доступ к печатным источникам, имеющимся в научной библиотеке ЧелГУ, с помощью специальных технических средств; доступ к электронным источникам, представленным в форме электронного документа в фонде научной библиотеки ЧелГУ или электронно-библиотечных системах, с помощью специальных технических и программных средств (рабочее место для незрячего пользователя с программным обеспечением экранного доступа с синтезом речи NVDA, рабочее место с компьютерным роллером и клавиатурой Clevy с большими кнопками и с разделяющей клавиши накладкой).

Учебно-методические материалы для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме шрифтом Брайля.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья освоение дисциплины может быть частично или полностью осуществлено с использованием дистанционных образовательных технологий (Moodle, Adobe Connect Pro и пр.).

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья используется индивидуальная работа. Под индивидуальной работой подразумевается две формы взаимодействия с преподавателем: индивидуальная учебная работа (консультации), т.е. дополнительное разъяснение учебного материала и углубленное изучение материала с теми обучающимися, которые в этом заинтересованы, и индивидуальная воспитательная работа. Индивидуальные консультации направлены на индивидуализацию обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или обучающимся с ограниченными возможностями здоровья.

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине обеспечивается выполнение следующих дополнительных требований в зависимости от индивидуальных особенностей, обучающихся:

- а) инструкция по порядку проведения процедуры оценивания предоставляется в доступной форме (устно, в письменной форме, в письменной форме шрифтом Брайля, устно с использованием услуг сурдопереводчика);
- б) доступная форма предоставления заданий оценочных средств (в печатной форме, в печатной форме увеличенным шрифтом, в печатной форме шрифтом Брайля, в форме электронного документа, задания зачитываются ассистентом, задания предоставляются с использованием сурдоперевода);
- в) доступная форма предоставления ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, письменно шрифтом Брайля, с использованием услуг ассистента, устно).

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. Эти средства могут быть предоставлены ЧелГУ или могут использоваться собственные технические



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

Рабочая программа дисциплины "Вычислительные методы в химии" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Органическая и биоорганическая химия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

стр. 12

средства. При необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на задания, процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.