

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 07.04.2025 16:21:20 Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfb98f3b6cb77a486b9a8788b8322323	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 2023

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

Челябинск 2023 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:

Знания, приобретенные в ходе изучения дисциплины "Вычислительные методы в химии", могут быть использованы при изучении дисциплин "Квантовая химия" и "Стереохимия и конформационный анализ".

Стереохимия и конформационный анализ

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;

Владеть:



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

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	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
1.2	Регрессионный анализ Уравнение регрессии, понятие функции отклика. Построение линейных регрессионных моделей в N-мерном пространстве. /Лек/	4	1	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
1.3	Регрессионный анализ Построение корреляций структура – свойство. /Лаб/	4	4	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
1.4	Защита отчёта Интерпретация полученных регрессионных моделей. /Лаб/	4	4	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
1.5	Консультации при написании отчёта /КонтАт/	4	6	
	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	Л1.1Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.2	Преобразование пространства по методу главных компонент /Лек/	4	1,5	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.3	Дискриминантный анализ /Лек/	4	0,5	Л1.1 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

2.4	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	Л1.1Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4
2.5	Численные методы Аналитическое дифференцирование. /Лек/	4	1	Л1.1Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.6	Численные методы Численное интегрирование: метод трапеций, формула Симпсона, квадратуры Гаусса-Лежандра. /Лек/	4	3	Л1.1 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
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 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!

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 к 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:

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,



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

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 университета, 2013	

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 государственног о университета, 2014	ЭБС
Л2.3	Вапник В. Н., Червоненкис А. Я.	Теория распознавания образов: Статистические проблемы обучения	М.: Наука, 1974	
Л2.4	Меррифилд Р., Вобла Д., Симмонс Х., Кинг Р., Глуховцев М. Н.	Химические приложения топологии и теории графов	Москва : Мир, 1987	
Л2.5	Зефиоров 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"



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

- | | |
|----|---|
| 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 библиотека имени Б. Н. Ельцина. – 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).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с подключением к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

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.).



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

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 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 «EIBraile-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 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.