

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

ХИМИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра химии

СОГЛАСОВАНА

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель образовательной программы

И.о. декана химико-биологического

_____ профессор Саламов А.М.

факультета _____ М.К.Дакиева

« 13 » _____ марта _____ 2025_г.

« 18 » _____ марта _____ 2025_г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: Органическая химия

Программа: специалитет

Квалификация (степень) выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очная

**МАГАС
2025**

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель –изучение и освоение современных методов математического моделирования химических, физико- химических и химико –технологических процессов.

Задачи:

-Ознакомление с методами формализации химических, физико- химических и химико – технологических процессов,

-изучения методов построения математической модели, которая отражает молекулярный механизм процесса или по крайней мере правильно отражает эмпирическую зависимость одной наблюдаемой в эксперименте величины от другой или нескольких других величин,

-обучение методом формулирования химической задачи на языке машинных программ и вычислительной математики, построения химически ориентированных алгоритмов.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» относится к обязательной части Блока 1; изучается в 6 семестре..

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» в силу занимаемого ей места в ФГОС ВО, ОПОП ВО и учебном плане по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия». В качестве «входных» знаний дисциплины «Вычислительные методы в химии» используются знания и умения, полученные обучающимися при изучении дисциплин неорганическая химия, органическая химия и физическая химия. Требования к входным знаниям, умениям и готовностям обучающегося: знать основы химии, информатики и владеть основами программирования.

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» служит информационной и методологической основой для научно- исследовательской работы и подготовки выпускной квалификационной работы

Связь дисциплины «Вычислительные методы в химии» со смежными дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, смежные с дисциплиной «Вычислительные методы в химии»	Семестр
Б1.О.17	Информатика	2
Б1.О.12	Математика	1,2

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	В результате освоения дисциплины обучающийся должен:
<i>Универсальные компетенции (УК) и индикаторы их достижения</i>			

УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	УК-1.1. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	Знать: свои личностные особенности и ресурсы Уметь: адекватно оценивать свои способности и возможности с соответствием конкретной ситуации Владеть: навыками самодиагностики личностных коммуникативных способностей в деловом взаимодействии
		УК-1.2. Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников	Знать: способы самосовершенствования своей деятельности с учетом своих личностных, деловых, коммуникативных качеств Уметь: определять приоритеты личного и профессионального роста Владеть: приемами целеполагания и планирования своей профессиональной деятельности
		УК-1.3. Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов	Знать: возможные варианты решения типичных задач Уметь: использовать инструменты непрерывного само-образования Владеть: методиками саморазвития и самообразования
		Общепрофессиональные (ОПК) компетенции и индикаторы их достижения	

ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	<p>ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности</p> <p>ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик</p> <p>ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений</p>	<p>Знать: теоретические основы органической химии, современный уровень ее развития; основы органической химии, физической химии, физики, математики.</p> <p>Уметь: определять и анализировать проблемы химии, планировать стратегию их решения; использовать знания теоретических основ химии, физики и математики для планирования химического эксперимента, обработки и интерпретации полученных результатов</p> <p>Владеть: навыками составления алгоритма решения экспериментальных и расчетно-теоретических задач в области органической химии; математическим аппаратом необходимым для решения задач органической химии</p>
--------------	---	---	---

Планируемые результаты обучения по уровням сформированности компетенций

Код компетенции	Уровень сформированности компетенции	Планируемые результаты обучения
УК – 1	Высокий уровень (<i>по отношению к базовому</i>)	<p>Знать: Способы разработки новых технологий включая системы дистанционного обучения с применением образовательных технологий</p> <p>Уметь: Работать с источниками, анализируя и проверяя информацию на предмет ее достоверности и значимости в освещении и оценке тех или иных образовательных технологий. Выявлять степень изученности рассматриваемых проблем, рассматривая отдельные стороны компьютерных технологий.</p> <p>Владеть:</p>

		Навыками образовательных технологий и дистанционным обучением
	Базовый уровень (<i>по отношению к минимальному</i>)	<p>Знать: разработки новых технологий включая системы дистанционного обучения с применением образовательных технологий</p> <p>Уметь: Работать с источниками, анализируя и проверяя информацию на предмет ее достоверности и значимости в освещении и оценке тех или иных образовательных технологий.</p> <p>Владеть: Навыками образовательных технологий</p>
	Минимальный уровень (<i>уровень, обязательный для всех обучающихся, осваивающих ОПОП</i>)	<p>Знать: системы дистанционного обучения с применением образовательных технологий</p> <p>Уметь: Работать с источниками, анализируя и проверяя информацию на предмет ее достоверности и значимость</p> <p>Владеть: технологий и дистанционным обучением</p>
ОПК-4	Высокий уровень (<i>по отношению к базовому</i>)	<p>Знать: Способы решения задач с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности</p> <p>Уметь: Работать с разделами информационных технологий, решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности</p> <p>Владеть: Навыками</p>

		использования задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности
	Базовый уровень (<i>по отношению к минимальному</i>)	<p>Знать: применение информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности</p> <p>Уметь: решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности</p> <p>Владеть: профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности</p>
	Минимальный уровень (<i>уровень, обязательный для всех обучающихся, осваивающих ОПОП</i>)	<p>Знать: Способы решения задач с применением информационно-коммуникационных технологий</p> <p>Уметь: Работать с разделами информационных технологий, решать задачи</p> <p>Владеть: Навыками использования задач профессиональной деятельности на основе информационных технологий</p>

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	6 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	72	72
Лекции	30	30
Практические занятия	42	42
Самостоятельная работа студентов	72	72

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

В данном разделе приводится содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий. Структура дисциплины по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий приведена в Таблице 3, содержание дисциплины по темам (разделам) – в Таблице 4.

Таблица 3. Структура дисциплины по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий

Примечание: Л – лекции, С – семинары, ЛЗ – лабораторные занятия, ГК/ИК – групповые / индивидуальные консультации

№	ТЕМА	Трудоемкость часов			
		Лекции	Практ. занятия	Самост.р	
	модуль 1				
1.1	Введение в численные методы	2	4	8	
1.2	Основы программирования	4	6	8	
	Модуль 2				

2.1	Вычисления по автономным алгоритмам	4	4	8	
2.2	Вычисление корней уравнений	4	6	8	
2.3	Системы линейных уравнений	4	6	10	
Модуль 3					
3.1	Численное интегрирование	4	4	10	
3.2	Дифференциальные уравнения	4	6	10	
3.3	Статистическая обработка экспериментальных данных	4	6	10	
Всего		30	42	72	

Таблица 4.

Содержание дисциплины по темам (разделам)

№	Наименование темы (раздела)	Содержание темы (раздела)
1.	Введение в численные методы	Задачи, требующие численного решения и допускающие численное решение. Область применимости численных методов. Типы решаемых задач. Вычислительные методы эквивалентных преобразований, методы аппроксимации, прямые методы, итерационные методы, методы статистических испытаний (методы Монте-Карло). Корректность вычислительной задачи.
2.	Основы программирования	Основные понятия и термины: модель, алгоритм, блок-схема программы, программа для ЭВМ, языки низкого и высокого уровня, интерпретация и трансляция текста программы. Основы языка BASIC. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Использование стандартных математических функций. Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения. Операторы: присвоения, ввода и вывода значений, организации циклов и разветвлений. Процедуры и функции. Внешние файлы данных.
3.	Вычисления по автономным алгоритмам	Типы автономных алгоритмов. Примеры автономных алгоритмов в химических задачах: вычисление теплотемкости веществ: вычисление средней длины свободного пробега молекул; вычисление мольной доли одноосновной кислоты и соответствующих анионов как функции. Построение блок-схемы программы для расчета текущих концентраций в системе с тремя агрегатами

№	Наименование темы (раздела)	Содержание темы (раздела)
4.	Вычисление корней уравнений	<p>Типы уравнений(линейные, алгебраические, трансцендентные) Линеаризация нелинейных уравнений. Примеры химических задач, приводящих к необходимости отыскания корней уравнений: уравнение состояние идеального газа; вычисление степени превращения в равновесных газовых реакциях; вычисление растворов слабых кислот; вычисление буферных растворов.</p> <p>Основные алгоритмы нахождения корней уравнений: методы половинного деления; метод хорд; метод простой итерации; метод Ньютона(касательных); метод секущих Блок- схема программы для нахождения равновесных концентрации газовой реакции по заданной константе равновесия методом Ньютона.</p>
5.	Системы линейных уравнений	<p>Системы линейных уравнений(СЛУ). Химические задачи, приводящие к необходимости решения СЛУ: определение объема компонентов сплавов; приготовление смесей химических веществ требуемого состава; определение концентрации веществ по закону Бэра.</p> <p>Основные алгоритмы решения СЛУ. Матричная форма. Совместная и несовместная СЛУ. Прямые методы :метод Гаусса, метод исключения, метод Крамера и вычисление определителей. Итерационные методы: метод простой итерации, метод Зейделя. Пример программы нахождения корней СЛУ методом Зейделя.</p>
6.	Численное интегрирование	<p>Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования: вычисление летучести газа, вычисление теплоемкости твердых тел, моделирование простой перегонки.</p> <p>Методы численного интегрирования: метод трапеций, методы левых, правых и средних прямоугольников, метод Симпсона.</p>
7.	Дифференциальные уравнения	<p>Примеры химических задач, приводящих к необходимости решения дифференциальных уравнений: интегрирование дифференциальных уравнений формальной кинетики химических реакций, описание явлений переноса. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера, метод Рунге-Кутта. Решение прямой задачи химической кинетики для консекутивных химических реакций.</p>
8.	Статистическая обработка экспериментальных данных	<p>Обработка данных методом наименьших квадратов(МНК).Линейный (МНК).Статистические характеристики оценок параметров модели. Интерполяция таблично заданной функции. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Факторы, определяющие точность интерполяции. Понятие сходимости интерполяционного процесса. Сплаины и их свойства. Построение кубического интерполяционного сплайна</p>

5. Образовательные технологии

Образовательный процесс по дисциплине организован в форме учебных занятий (контактная работа (аудиторной и внеаудиторной) обучающихся с преподавателем и самостоятельная работа обучающихся). Учебные занятия представлены следующими видами, включая учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости:

- лекции (занятия лекционного типа);
- семинары, практические занятия (занятия семинарского типа);
- групповые консультации;
- индивидуальные консультации и иные учебные занятия, предусматривающие индивидуальную работу преподавателя с обучающимся;
- самостоятельная работа обучающихся;
- занятия иных видов.

На учебных занятиях обучающиеся выполняют запланированные настоящей программой отдельные виды учебных работ. Учебное задание (работа) считается выполненным, если оно оценено преподавателем положительно.

В рамках самостоятельной работы обучающиеся осуществляют теоретическое изучение дисциплины с учётом лекционного материала, готовятся к практическим занятиям, выполняют домашнее задание, осуществляют подготовку к промежуточной аттестации.

Содержание дисциплины, виды, темы учебных занятий и форм контрольных мероприятий дисциплины представлены в разделе 5 настоящей программы и фонде оценочных средств по дисциплине.

Текущая аттестация по дисциплине (модулю). Оценивание обучающегося на занятиях осуществляется в соответствии с положением о текущей аттестации обучающихся в университете.

По итогам текущей аттестации, ведущий преподаватель (лектор) осуществляет допуск обучающегося к промежуточной аттестации.

Допуск к промежуточной аттестации по дисциплине (модулю). Обучающийся допускается к промежуточной аттестации по дисциплине в случае выполнения им всех заданий и мероприятий, предусмотренных настоящей программой дисциплины в полном объеме. Преподаватель имеет право изменять количество и содержание заданий, выдаваемых обучающимся (обучающемуся), исходя из контингента (уровня подготовленности).

Допуск обучающегося к промежуточной аттестации по дисциплине осуществляет преподаватель, ведущий семинарские (практические) занятия.

Обучающийся, имеющий учебные (академические) задолженности (пропуски учебных занятий, не выполнивший успешно задания(е)) обязан отработать их в полном объеме.

Отработка учебных (академических) задолженностей по дисциплине (модулю). В случае наличия учебной (академической) задолженности по дисциплине, обучающийся отрабатывает пропущенные занятия и выполняет запланированные и выданные преподавателем задания. Отработка проводится в период семестрового обучения или в период сессии согласно графику (расписанию) консультаций преподавателя.

Обучающийся, пропустивший *лекционное занятие*, обязан предоставить преподавателю реферативный конспект соответствующего раздела учебной и монографической литературы (основной и дополнительной) по рассматриваемым вопросам в соответствии с настоящей программой.

Обучающийся, пропустивший *практическое занятие*, отрабатывает его в форме реферативного конспекта соответствующего раздела учебной и монографической литературы (основной и дополнительной) по рассматриваемым на *практическом* занятии вопросам в соответствии с настоящей программой или в форме, предложенной преподавателем. Кроме того, выполняет все учебные задания. Учебное задание считается выполненным, если оно оценено преподавателем положительно.

Преподаватель имеет право снизить балльную (в том числе рейтинговую) оценку обучающемуся за невыполненное в срок задание (по неуважительной причине).

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю). Формой промежуточной аттестации по дисциплине определен Зачет.

Промежуточная аттестация обучающихся осуществляется в соответствии с положением о промежуточной аттестации обучающихся в университете и оценивается: *на зачете – зачтено; незачтено* и рейтинговых баллов, назначаемых в соответствии с принятой в вузе балльно-рейтинговой системой.

Зачет принимает преподаватель, ведущий семинарские (практические) занятия по курсу.

Оценка знаний обучающегося оценивается по критериям, представленным в фонде оценочных средств по дисциплине.

6. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Таблица 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№ разд ела	Наименование раздела	Содержание средств контроля (вопросы самоконтроля)	Учебно-методическое обеспечение*
<i>гр.1</i>	<i>гр.2</i>	<i>гр.3</i>	<i>гр.4</i>
1.	Введение в численные методы	Работа с литературой. Решение задач Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка реферата	О: [1-1] Д: [1-3]
2.	Основы программирования	Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка реферата Подготовка к вопросам промежуточной аттестации, связанных с темой	О: [1-1] Д: [1-3]
3.	Вычисления по автономным алгоритмам	Проверочный тест по предыдущему модулю. Работа с литературой. Подготовка к контрольной работе	О: [1-1] Д: [1-3]
4.	Вычисление корней уравнений	Работа с литературой. Решение задач Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка к вопросам промежуточной аттестации, связанных с темой. Написание и отладка программ.	О: [1-1] Д: [1-3]
5.	Системы линейных уравнений	Работа с литературой. Решение задач Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка к вопросам промежуточной аттестации, связанных с темой. Написание и отладка программ. Подготовка к вопросам промежуточной аттестации, связанных с темой	О: [1-1] Д: [1-3]
6.	Численное интегрирование	Проверочный тест по предыдущему модулю. Работа с литературой. Решение задач. Подготовка к контрольной работе	О: [1-1] Д: [1-3]
7.	Дифференциальные	Работа с литературой. Решение задач	О: [1-1]

	уравнения	Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка реферата	Д: [1-3]
8.	Статистическая обработка экспериментальных данных	Работа с литературой. Решение задач Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка к вопросам промежуточной аттестации, связанных с темой. Написание и отладка программ.	О: [1-1] Д: [1-3]

Примечание: О: – основная литература, Д: – дополнительная литература; в скобках – порядковый номер по списку

Для более углубленного изучения темы задания для самостоятельной работы рекомендуется выполнять параллельно с изучением данной темы. При выполнении заданий по возможности используйте наглядное представление материала. Система накопления результатов выполнения заданий позволит вам создать копилку знаний, умений и навыков, которую можно использовать как при прохождении практики, так и в будущей профессиональной деятельности.

7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

ФОС приведен ниже

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение учебной дисциплины/модуля

8.1. Основная литература

1. **Вержбицкий В.М.** Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения): учебное пособие для вузов. М.: Директ-Медиа, 2013. Электронный ресурс URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214561&sr=1\(11.03.20150\)](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214561&sr=1(11.03.20150))

8.2. Дополнительная литература

1. **Ращиков В.И.** Численные методы. Компьютерный практикум М.: МИФИ, 2010. Электронный ресурс URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214561&sr=1\(11.03.20150\)](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214561&sr=1(11.03.20150))
2. Численные методы анализа: приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения: учебное пособие для студентов вузов / **Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова.** Санкт-Петербург: Лань, 2010.

3. **Хохлов А.Г.** Математические методы и компьютерные технологии в науке и образовании: учебное пособие для вузов 2013г.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. e-Library.ru [Электронный ресурс]: Научная электронная библиотека. – URL: <http://elibrary.ru/> (дата обращения 11.05.2018).
2. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» [Электронный ресурс]. – URL: <http://cyberleninka.ru/> (дата обращения 11.05.2018).
3. Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» [Электронный ресурс]. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php> (дата обращения 11.07.2018). – Доступ к системе согласно правилам ЭБС и договором университета с ЭБС.
4. Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/> (дата обращения 11.07.2018). – Доступ к системе согласно правилам ЭБС и договором университета с ЭБС.

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Для успешного обучения обучающийся должен готовиться к лекции, которая является важнейшей формой организации учебного процесса. Лекция:

- знакомит с новым учебным материалом,
- разъясняет учебные элементы, трудные для понимания,
- систематизирует учебный материал,
- ориентирует в учебном процессе.

Подготовка к лекции заключается в следующем:

- внимательно прочитайте материал предыдущей лекции,
- выясните тему предстоящей лекции (по тематическому плану, по информации лектора),
- ознакомьтесь с учебным материалом по учебнику и учебным пособиям,
- постарайтесь определить место изучаемой темы в своей профессиональной подготовке,
- запишите возможные вопросы, которые вы зададите лектору на лекции.

Подготовка к лабораторным занятиям:

- внимательно прочитайте материал лекций, относящихся к данному семинарскому занятию, ознакомьтесь с учебным материалом по учебнику и учебным пособиям,
- использование типовых компьютерных программ(Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций
- ответьте на контрольные вопросы по семинарским занятиям, готовьтесь дать развернутый ответ на каждый из вопросов,
- определите, какие учебные элементы остались для вас неясными и постарайтесь получить на них ответ заранее (до семинарского занятия) во время текущих консультаций преподавателя,
- работа с интернетом,
- работа с информационным порталом,
- выполните домашнее задание.

Учтите, что:

- готовиться можно индивидуально, парами или в составе малой группы (последние являются эффективными формами работы);
- рабочая программа дисциплины в части целей, перечню знаний, умений, терминов и учебных вопросов может быть использована вами в качестве ориентира в организации обучения.

Подготовка к промежуточной аттестации. К промежуточной аттестации необходимо готовиться целенаправленно, регулярно, систематически и с первых дней обучения по данной дисциплине. Попытки освоить дисциплину в период зачётно-экзаменационной сессии, как правило, показывают не удовлетворительные результаты.

В самом начале учебного курса познакомьтесь с рабочей программой дисциплины и другой учебно-методической документацией, включающими:

- перечень знаний и умений, которыми обучающийся должен владеть;
- тематические планы лекций и практических занятий;
- контрольные мероприятия;
- учебники, учебные пособия, а также электронные ресурсы;
- перечень экзаменационных вопросов (вопросов к зачету).

После этого у вас должно сформироваться чёткое представление об объеме и характере знаний и умений, которыми надо будет овладеть по дисциплине. Систематическое выполнение учебной работы на лекциях и практических занятиях позволит успешно освоить дисциплину и создать хорошую базу для прохождения промежуточной аттестации.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

11.1. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю)

- При осуществлении образовательного процесса применяются информационные технологии, необходимые для подготовки презентационных материалов и материалов к занятиям (компьютеры с программным обеспечением для создания и показа презентаций, с доступом в сеть «Интернет», поисковые системы и справочные, профессиональные ресурсы в сети «Интернет»). использование типовых компьютерных программ(Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций

В вузе оборудованы помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду вуза.

11.2. Перечень программного обеспечения

Для подготовки презентаций и их демонстрации необходима программа Impress из свободного пакета офисных приложений Open Office (или иной аналог с коммерческой или свободной лицензией).

11.3. Перечень информационных справочных систем

1. Словари и энциклопедии на Академике [Электронный ресурс] // Академик. – URL: <http://dic.academic.ru>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru>. – Доступ к системе согласно правилам ЭБС и договором университета с ЭБС.

12. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины/модуля

Материально-техническое обеспечение учебного процесса по дисциплине определено нормативными требованиями, регламентируемыми приказом Министерства образования и науки РФ № 986 от 4 октября 2010 г. «Об утверждении федеральных требований к образовательным учреждениям в части минимальной оснащенности учебного процесса и оборудования учебных помещений», Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки.

Для проведения всех видов учебных занятий по дисциплине и обеспечения интерактивных методов обучения, необходимы столы, стулья (на группу по количеству посадочных мест с возможностью расстановки для круглых столов, дискуссий, прочее); доска интерактивная с рабочим местом (мультимедийный проектор с экраном и рабочим местом); желателен доступ в информационно-коммуникационную сеть «Интернет».

В соответствие с требованиями ФГОС ВО при реализации настоящей дисциплины ОПОП ВО необходимо также учитывать образовательные потребности обучающихся с ограниченными возможностями здоровья, обеспечивать условия для их эффективной реализации, а также возможности беспрепятственного доступа обучающихся с ограниченными возможностями здоровья к объектам инфраструктуры образовательного учреждения.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

В процессе освоения образовательной программы компетенции формируются по следующим этапам:

- 1) начальный этап дает общее представление о виде деятельности, основных закономерностях функционирования объектов профессиональной деятельности, методов и алгоритмов решения практических задач;
- 2) основной этап позволяет решать типовые задачи, принимать профессиональные и управленческие решения по известным алгоритмам, правилам и методикам;
- 3) завершающий этап предполагает готовность решать практические задачи повышенной сложности, нетиповые задачи, принимать профессиональные и управленческие решения в условиях неполной определенности, при недостаточном документальном, нормативном и методическом обеспечении.

При освоении дисциплины (модуля) компетенции, закрепленные за ней, реализуются по темам (разделам) дисциплины (модуля), в определенной степени (полностью или в оговоренной части) и на определенном этапе, что приведено в Таблице 1.

Таблица 1.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

№	Код компетенции	Номер темы (раздела) дисциплины (модуля)	Степень реализации компетенции при освоении дисциплины (модуля)	Этап формирования компетенции при освоении дисциплины (модуля)
1.	УК-1	1-3	Компетенция реализуется в части готовностью реализовывать образовательные программы по учебному предмету в соответствии с требованиями образовательных стандартов	начальный
2.	ОПК-4	1-3	способностью использовать современные методы и технологии обучения и диагностики	Начальный
3.	ОПК-4	1-3	Способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-	Начальный

			коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности	
--	--	--	---	--

Код компетенции	Критерии в соответствии с уровнем освоения ОП			Виды занятий (лекции, семинарские, практические, лабораторные)	Оценочные средства (тесты, творческие работы, проекты и др.)
	Пороговый (удовл.) 61-75 баллов	Базовый (хор) 76-90 баллов	Повышенный (отл) 91-100 баллов		
ПК-12	<p>Знает: Общие профессиональные задачи химии, требующие применения вычислительных методов</p> <p>Умеет: Адаптировать абстрактные вычислительные методы к решению профессиональных задач</p> <p>Владеет: Основной учебной литературой по вычислительным методам</p>	<p>Знает: Специфику профессиональных задач химии, требующих применения вычислительных методов</p> <p>Умеет: Выбирать эффективные Алгоритмы вычислений при Решении нестандартных Профессиональных задач</p> <p>Владеет: Учебной, научной и справочной литературой по вычислительным методам</p>	<p>Знает: Возможности и ограничения вычислительных методов для решения профессиональных задач химии</p> <p>Умеет: Разрабатывать новые варианты вычислительных методов и использовать их для решения профессиональных задач</p> <p>Владеет: языками программирования для реализации вычислительных методов</p>	Лекции, семинарские занятия Самостоятельная работа студентов	Опросы; Контрольные работы; собеседования, вопросы для зачета
ОПК-3	<p>Знает: Основные понятия вычислительных методов применяемых для решения химических задач</p> <p>Умеет: Практически использовать вычислительные</p>	<p>Знает: Основные понятия вычислительных методов применяемых для решения химических задач и алгоритмы их реализации</p> <p>Умеет: Практически использовать вычислительные</p>	<p>Знает: Основные понятия вычислительных методов применяемых для решения химических задач и алгоритмы их реализации, приемы программирования</p> <p>Умеет: Разрабатывать новые вычислительные методы для решения</p>	Лекции, семинарские занятия Самостоятельная работа студентов	Опросы; Контрольные работы; собеседования, вопросы для зачета

	методы для решения стандартных химических задач Владеет: Навыками использования учебной литературы в области вычислительных методов	методы для решения нестандартных химических задач Владеет: Информационными технологиями в области вычислительных методов	нестандартных химических задач Владеет: Навыками самостоятельного программирования при использовании вычислительных методов		
ОПК-4	Знает: Основные понятия вычислительных методов, применяемых для решения химико-технологических задач Умеет: Практически использовать вычислительные Методы ля решения стандартных химико-технологических задач Владеет: Навыками использования учебной литературы в области вычислительных методов в химической технологии	Знает: Основные понятия вычислительных методов, применяемых для решения химико-технологических задач и алгоритмы их реализации Умеет: Практически использовать вычислительные Методы ля решения нестандартных химико-технологических Владеет: Информационными технологиями в области вычислительных методов химической технологии	Знает: Основные понятия вычислительных методов, применяемых для решения химико-технологических задач и алгоритмы их реализации, приемы программирования Умеет: Разрабатывать новые вычислительные Методы ля решения нестандартных химико-технологических з Владеет: Навыками самостоятельного программирования при использовании вычислительных методов химической технологии	Лекции, семинарские занятия Самостоятель ная работа студентов	Опросы; Контрольные работы; собеседования, вопросы для зачета

2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Шкала оценивания, показатели и критерии оценивания образовательных результатов обучающегося во время текущей аттестации

Шкала оценивания	Показатели и критерии оценивания
------------------	----------------------------------

5, «отлично»	Оценка «отлично» ставится, если студент строит ответ логично в соответствии с планом, показывает максимально глубокие знания профессиональных терминов, понятий, категорий, концепций и теорий. Устанавливает содержательные межпредметные связи. Развернуто аргументирует выдвигаемые положения, приводит убедительные примеры.
4, «хорошо»	Оценка «хорошо» ставится, если студент строит свой ответ в соответствии с планом. В ответе представлены различные подходы к проблеме, но их обоснование недостаточно полно. Устанавливает содержательные межпредметные связи. Развернуто аргументирует выдвигаемые положения, приводит необходимые примеры, однако показывает некоторую непоследовательность анализа. Выводы правильны. Речь грамотна, используется профессиональная лексика.
3, «удовлетворительно»	Оценка «удовлетворительно» ставится, если ответ недостаточно логически выстроен, план ответа соблюдается непоследовательно. Студент обнаруживает слабость в развернутом раскрытии профессиональных понятий. Выдвигаемые положения декларируются, но недостаточно аргументированы. Ответ носит преимущественно теоретический характер, примеры ограничены, либо отсутствуют.
2, «неудовлетворительно»	Оценка «неудовлетворительно» ставится при условии недостаточного раскрытия профессиональных понятий, категорий, концепций, теорий. Студент проявляет стремление подменить научное обоснование проблем рассуждениями обыденно-повседневного бытового характера. Ответ содержит ряд серьезных неточностей. Выводы поверхностны

Шкала оценивания, показатели и критерии оценивания образовательных результатов обучающегося на зачете по дисциплине

Результат зачета	Показатели и критерии оценивания образовательных результатов
зачтено	<p>Результат «зачтено» выставляется обучающемуся, если рейтинговая оценка (средний балл) его текущей аттестации по дисциплине входит в данный диапазон.</p> <p>При этом, обучающийся на учебных занятиях и по результатам самостоятельной работы демонстрировал знание материала, грамотно и по существу излагал его, не допускал существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применял использовал в ответах учебно-методический материал исходя из специфики практических вопросов и задач, владел необходимыми навыками и приёмами их выполнения.</p> <p>Учебные достижения в семестровый период и результаты рубежного контроля демонстрируют высокую (15...13) / хорошую (12..10) / достаточную (9...7) степень овладения программным материалом.</p> <p>Рейтинговые баллы назначаются обучающемуся как среднеарифметическое рейтинговых оценок по текущей аттестации (на занятиях и по результатам выполнения контрольных заданий) и промежуточной (экзамен) аттестации.</p> <p>Компетенции, закреплённые за дисциплиной, сформированы на уровне от достаточного до высокого.</p>
не зачтено	<p>Результат «не зачтено» выставляется обучающемуся, если рейтинговая оценка (средний балл) его текущей аттестации по дисциплине входит в данный диапазон.</p> <p>При этом, обучающийся на учебных занятиях и по результатам самостоятельной работы демонстрирует незнание значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с</p>

Результат зачета	Показатели и критерии оценивания образовательных результатов
	<p>большими затруднениями выполняет практические работы. Как правило, «не зачтено» ставится обучающимся, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.</p> <p>Учебные достижения в семестровый период и результаты рубежного контроля демонстрируют невысокую (недостаточную) степень овладения программным материалом.</p> <p>Рейтинговые баллы назначаются обучающемуся как среднеарифметическое рейтинговых оценок по текущей аттестации (на занятиях и по результатам выполнения контрольных заданий) и промежуточной (экзамен) аттестации.</p> <p>Компетенции, закреплённые за дисциплиной, не сформированы</p>

3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Для оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций используются следующие типовые контрольные задания:

3.1. Текущий контроль успеваемости

Примерные типы задач для самостоятельного решения и контрольных работ

1. Для заданной ситуации определить набор переменных и констант, указать их типы, размерности массивов.
2. Построить линейную программу для вычислений по заданной формуле. Скомпилировать и проверить работоспособность.
3. Построить программу для вычислений по заданной формуле, содержащей цикл. Скомпилировать и проверить работоспособность.
4. Построить программу для вычислений по заданной формуле, содержащую подпрограммы. Скомпилировать и проверить работоспособность.
5. Построить программу ввода и вывода данных с использованием дисковых файлов. Скомпилировать и проверить работоспособность.
6. Вычислить теплотемкость заданного вещества по табличным данным с использованием разработанной программы.
7. Вычислить мольную долю двухосновной кислоты и соответствующих анионов как функции с использованием разработанной программы.
8. Вычислить текущие концентрации реагентов в указанной системе с тремя реагентами.
9. Вычислить pH раствора указанной слабой кислоты.
10. Вычислить количество компонентов, необходимых для приготовления смеси требуемого состава.
11. Вычислить концентрации веществ в смеси по параметрам оптического спектра.
12. Вычислить концентрации компонентов газовой смеси из данных масс-спектрометрии.
13. Вычислить мольную теплотемкость указанного вещества при различных температурах.
14. Построить кинетическую кривую методом численного интегрирования дифференциального кинетического уравнения.
15. Провести статистическую обработку заданного массива экспериментальных данных.

Типовые тесты / задания

1. Установите соответствие

1. Табличный процессор	а) Любая прямоугольная часть таблицы
2. Электронные таблицы	б) Предназначены для организации табличных расчетов на компьютере
3. Диапазон таблицы	в) Прикладная программа, предназначена для работы с электронными таблицами

2. Выберите все возможные варианты ответа:

Содержимым ячейки может быть:

1. Картинка
2. Текст
3. Числовое значение
4. Формула

3. Установите правильную последовательность структурных единиц электронной таблицы:

1. Строка
2. Ячейка
3. Столбец

4. Выберите правильный ответ:

Количество столбцов листа равно:

1. 456
2. 256
3. 656

5. Выберите правильный ответ:

Количество строк листа равно:

1. 75536
2. 85536
3. 65536

6. Выберите правильный ответ:

Наименьшая структурная единица электронной таблицы

1. Строка
2. Столбец
3. Ячейка

7. Выберите все возможные варианты ответа

Сортировать данные таблицы можно по:

1. Алфавиту
2. Возрастанию
3. Убыванию

8. Выберите все возможные варианты ответа

К статистическим функциям относятся:

1. Сумм
2. Срзнач
3. Мин
4. Макс
5. Если
6. Или

9. Выберите все возможные варианты ответа

К логическим функциям относятся:

1. Сумм
2. Мин
3. И
4. Или
5. Если

10. Выберите все возможные варианты ответа

К математическим функциям относятся:

1. Если
2. Sin

3. Cos
4. Log
5. Корень
6. Или

11. Выберите вариант ответа

Запись формулы (расчет) в ячейке начинается со знака:

1. + (плюс)
2. = (равно)
3. *(умножить)
4. - (минус)

12. Выберите вариант ответа

Для переноса слов в ячейке выполнить действия:

1. Выделить ячейку → меню Формат → Ячейки → Выравнивание → Отображение
2. Поставить курсор в ячейку → меню Формат → Ячейки → Видоизменение

13. Выберите вариант ответа

Для написания верхнего, нижнего индекса выполнить действия:

1. Поставить курсор в ячейку → меню Формат → Ячейки → Видоизменение
2. Выделить ячейку → меню Формат → Ячейки → Выравнивание → Отображение

14. Установите соответствие:

1. Строка	а) Идентификация: номер строки (1,2...,65536
2. Столбец	б) Идентификация: буквенное имя по алфавиту (A,B...,Z)
3. Ячейка	в) Идентификация: столбец, строка (A1)

15. Выберите вариант ответа:

Абсолютный адрес ячейки обозначается клавишей

1. F2
2. F4

3. F3

16. Установите соответствие:

1.Относительная адресация ячеек	а) При перемещении формулы в другую ячейку адрес ячейки не изменяется
2.Абсолютная адресация ячеек	б) При перемещении формулы в другую ячейку изменяются адреса ячеек
3.Сортировка данных в ЭТ	в) Отбор записей, удовлетворяющих условиям поиска, заданным в форме фильтра
4.Поиск данных в ЭТ	г) Упорядочение записей по значениям одного из полей

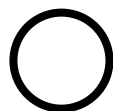
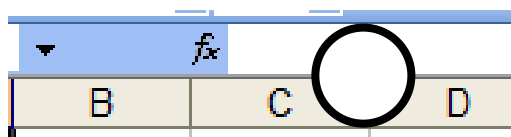
17. Установите соответствие:

1. Круговая диаграмма	а) Сопоставляет между собой отдельные величины
2.Столбчатая диаграмма (гистограмма)	б) Отображает вклад каждого значения в общую сумму
3. Деловая графика	в) Возможность построения графиков и диаграмм по числовым данным

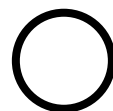
18. Расположите по порядку убывания старшинства операции:

1. -, + (сложение, вычитание)
2. ^ (возведение в степень)
3. *, / (умножение, деление)

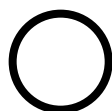
19. Установите соответствие:



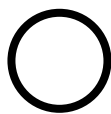
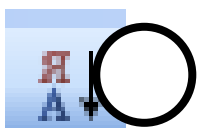
Сортировка по возрастанию



Сортировка по убыванию



Строка формул



Объединить и поместить в центр

20. Выберите правильные варианты ответов:

Электронная таблица состоит из

1. Столбцов
2. Строк
3. Абзацев

21. Установите соответствие:

1. электронная таблица существует в форме	а) рабочего листа
2. рабочие листы объединены	б) книги
3. рабочий лист имеет	в) имя

22. Установите соответствие:

1. электронная таблица состоит	а) заголовок столбца, заголовок строки
2. заголовки столбцов обозначаются	б) числами
3. заголовки строк обозначаются	в) буквами, сочетаниями букв
4. ячейка, с которой производятся действия	г) активная, выделяется рамкой
5. адрес ячейки ЭТ включает	д) столбцов, строк

23. Выберите правильный вариант ответа:

Укажите запись, удовлетворяющую записи в редакторе Excel:

1. =A1+B1
2. C3+4*D4
3. C3=C1+2*C2

24. Выберите правильный вариант ответа:

Укажите запись, удовлетворяющую записи в редакторе Excel:

1. $=5(A2+C3)/3(2B2-3D3)$
2. $5*(A2+C3)/3=(2*B2-3*D3)$
3. $=5*(A2+C3)/(3*(2*B2-3*D3))$

25. Выберите правильный вариант ответа:

При копировании формулы из ячейки C2 в ячейку C3 получим формулу:

	A	B	C	D
1	25			
2	10	20	225	
3	15	10		
4				

1. $=A1+(A2*B2)$
2. $=A$1+A2*B2$
3. $=A$1+A3*B3$

4. $=A$1+(A3*B3)$

26. Установите соответствие

- а) Столбец
- б) Строка
- в) Ячейка
- г) Диапазон ячеек

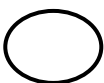
	A	B	C	D	E	F	G
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							

27. Дополните:

Поиск данных в электронной таблице осуществляется с

ПОМОЩЬЮ...

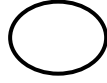
28. Установите соответствие:



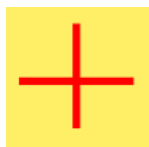
Перенести ячейку (блок)



Выделить ячейку (блок)



Выполнить автозаполнение



Изменить размер ячейки

1.

Типовые контрольные вопросы

1. Задачи, требующие численного решения и допускающие численное решение. Область применимости численных методов.
2. Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Моделирование как способ проверки гипотез. Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования.
3. Погрешности численных методов. Источники ошибок вычислений
4. Основные понятия и термины: модель, алгоритм, блок-схема программы, программа для ЭВМ, языки низкого и высокого уровня.
5. Основы языка BASIC. Типы величин. Константы и переменные. Массивы.
6. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Использование стандартных математических функций.
7. Логические выражения. Операторы: присвоения, ввода и вывода значений, организации циклов и разветвлений. Процедуры и функции. Внешние файлы данных.
8. Примеры автономных алгоритмов в химических задачах.
9. Примеры химических задач, приводящих к необходимости отыскания корней уравнений. Основные алгоритмы нахождения корней уравнений.
10. Системы линейных уравнений (СЛУ). Химические задачи, приводящие к необходимости решения СЛУ. Основные алгоритмы решения СЛУ.
11. Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования. Методы численного интегрирования.
12. Примеры химических задач, приводящих к необходимости решения дифференциальных уравнений.

13. Обработка данных методом наименьших квадратов(МНК).Линейный (МНК).Статистические характеристики оценок параметров модели.

14. Нелинейный (МНК). Интерполяция таблично заданной функции. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Факторы, определяющие точность интерполяции. Понятие сходимости интерполяционного процесса.

4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания достижения запланированных результатов обучения по дисциплине (модулю)

Текущая аттестация

При оценивании устного опроса и участия в дискуссии на семинаре (практическом занятии) учитываются:

- степень раскрытия содержания материала;
- изложение материала (грамотность речи, точность использования терминологии и символики, логическая последовательность изложения материала;
- знание теории изученных вопросов, сформированность и устойчивость используемых при ответе умений и навыков.

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются такие процедуры и технологии как тестирование и опрос на семинарах (практических занятиях).

Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие процедуры и технологии:

- практические контрольные задания (далее – ПКЗ), включающих одну или несколько задач (вопросов) в виде краткой формулировки действий (комплекса действий), которые следует выполнить, или описание результата, который нужно получить.

По сложности ПКЗ разделяются на простые и комплексные задания.

Простые ПКЗ предполагают решение в одно или два действия. К ним можно отнести: простые ситуационные задачи с коротким ответом или простым действием; несложные задания по выполнению конкретных действий. Простые задания применяются для оценки умений. Комплексные задания требуют многоходовых решений как в типичной, так и в нестандартной ситуациях. Это задания в открытой форме, требующие поэтапного решения и развернутого ответа, в т.ч. задания на индивидуальное или коллективное выполнение проектов, на выполнение практических действий или лабораторных работ. Комплексные практические задания применяются для оценки владений.

Типы практических контрольных заданий:

- задания на установление правильной последовательности, взаимосвязанности действий, выяснения влияния различных факторов на результаты выполнения задания;
- установление последовательности (описать алгоритм выполнения действия),

- нахождение ошибок в последовательности (определить правильный вариант последовательности действий);
- указать возможное влияние факторов на последствия реализации умения и т.д.
- задания на принятие решения в нестандартной ситуации (ситуации выбора, многоальтернативности решений, проблемной ситуации).

Оценивание обучающегося на текущей аттестации осуществляется в соответствии с критериями, представленными в п. 2, и носит балльный характер.

Рабочая программа дисциплины «Вычислительные методы в химии» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01. «Фундаментальная и прикладная химия», утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652

Программу составила ст. преподаватель Горбакова З.С.

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 7 от «13» марта 2025 г.

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом

химико-биологического факультета

Протокол заседания № 10 от «18» марта 2025 г.

**Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и регистрации
изменений**

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата)	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой