

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Компьютерные технологии в науке и производстве

Код модуля
1157996(1)

Модуль
Проектирование химических производств
органического синтеза

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Обыденнов Константин Львович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	технологии органического синтеза

Согласовано:

Управление образовательных программ

С.А. Иванченко

Авторы:

- **Обыденнов Константин Львович, Доцент, технологии органического синтеза**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Компьютерные технологии в науке и производстве**

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Практические/семинарские занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	1
		Домашняя работа	1

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Компьютерные технологии в науке и производстве**

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Способность к самообразованию, к самостоятельному освоению новых методов математического анализа и моделирования З-1 - Привести примеры использования методов моделирования и математического анализа в решении задач, относящихся к профессиональной деятельности З-2 - Перечислить и дать краткую характеристику освоенным за время обучения пакетам прикладных программ, используемых для моделирования при решении	Домашняя работа Контрольная работа Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен

	<p>задач в области профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Решать поставленные задачи, относящиеся к области профессиональной деятельности, используя освоенные за время обучения пакеты прикладных программ для моделирования и математического анализа</p> <p>У-1 - Обоснованно выбрать возможные методы моделирования и математического анализа для предложенных задач профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Выбирать пакеты прикладных программ для использования их в моделировании при решении поставленных задач в области профессиональной деятельности</p>	
<p>ПК-21 -Способность искать и подготавливать и систематизировать информацию для составления обзоров, отчетов и научных публикаций, участвовать во внедрении результатов исследований и разработок</p>	<p>З-2 - Перечислить методы обработки экспериментальных данных с использованием пакетов программ</p> <p>П-2 - Систематизировать информационный обзор</p> <p>П-3 - Грамотно пользоваться справочной литературой</p> <p>П-4 - Использовать современные компьютерные технологии при обработке результатов научных экспериментов</p> <p>У-2 - Работать с информацией из различных источников</p> <p>У-3 - Обрабатывать, представлять и оценивать результаты лабораторных работ и индивидуального домашнего задания</p> <p>У-4 - Применить необходимые современные компьютерные технологии для организации научных исследований</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Контрольная работа</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> <p>Экзамен</p>

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>домашняя работа</i>	4	40
<i>контрольная работа</i>	8	60
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.5		
Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.5		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.5		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>отчет по лабораторным работам</i>	10	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	11	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	12	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	13	20
<i>отчет по лабораторным работам</i>	14	20
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 1		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		

Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Компьютерные технологии в промышленности и науке, историческая ретроспектива
2. Компьютерное представление химической информации
3. Сквозные технологии и цифровые инструменты в науке и технике

4. Трехмерное проектирование в разработке аппаратов для технологий органического синтеза

5. Машинное обучение в науке и производстве продуктов органического синтеза

6. Компьютерное зрение в науке и производстве продуктов органического синтеза

7. Компьютерная обработка звука в науке и производстве продуктов органического синтеза

Примерные задания

1. Какие символы в InChI предшествуют описанию слоя зарядов:

- a) /t
- b) /q
- c) /a
- d) /w

2. Какая запись относится к записи InChIKey для ацетона:

- a) CC(C)=O
- b) InChI=1S/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3
- c) CSCPPACGZOOCGX-UHFFFAOYSA-N
- d) 1V1

3. Какие задачи относятся к типичным постановкам задач для машинного обучения:

- a) Кластеризация
- b) Регрессия
- c) Классификация
- d) Замещение
- e) Трансформация

4. Какие методы машинного обучения относятся к кластеризации:

- a) K-средних
- b) DBSCAN
- c) Линейная регрессия
- d) Метод опорных векторов

5. Какой из методов является инвариантным к повороту изображений?

- a) Признаки Хероха
- b) SIFT
- c) average Hash
- d) difference Hash

6. Какой из методов относится к обработке изображений?

- a) Нормализация и бинаризация
- b) Дистрибутивная семантика
- c) Борьба с аддитивным шумом
- d) Сингулярное разложение

7. Укажите основные области применения языка R:

- a) Статистический анализ данных
- b) Визуализация данных
- c) Редактирование картинок
- d) Компьютерное зрение
- e) 3D-моделирование

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа

Примерный перечень тем

1. Методы компьютерного моделирования в химической науке и технологии органических соединений

Примерные задания

Примерный перечень тем

1. Методы компьютерного моделирования в химической науке и технологии органических соединений

Примерные задания

- 1) Рассчитать стандартную теплоту образования 4-хлордодекана методом инкрементов.
- 2) Из заданного sdf файла осуществить отбор органических соединений, содержащих пятичленные гетероциклы, содержащие по крайней мере одну экзоциклическую C=C связь.
- 3) Осуществить конформационный анализ для циклогептана. Вычислить параметры искривления цикла для каждой конформации.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Домашняя работа

Примерный перечень тем

1. Компьютерное зрение в науке и производстве продуктов органического синтеза

Примерные задания

Осуществить обучение компьютерной программы (любым выбранным вами инструментом) для распознавания различных объектов и подсчета их количества.

Возможные объекты для распознавания:

- a) лица людей;
- b) объекты одного цвета;
- c) листья;
- d) клетки;
- e) цифры;
- f) шестигранники.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. Основные способы компьютерного представления структур органических соединений.
2. Правила представления органических соединений в виде строк WLN.
3. Правила представления органических соединений в виде строк SMILES.
4. Правила представления органических соединений в виде строк InChI.
5. Основные способы представления трехмерных структур органических соединений. Форматы xyz, mol, pdb.
6. Основные способы представления трехмерных структур органических соединений. Форматы xyz, mol2, sdf.
7. Правила составления шаблонов для спецификации молекулярных фрагментов (SMART).
8. Понятие 3D-моделирования. Назначение и возможности инструмента KompasFlow.
9. Цели и задачи основных этапов машинного обучения без учителя и с учителем.
10. Отбор признаков для машинного обучения.
11. Понятие методов наискорейшего спуска и сопряженных градиентов. Примеры применения данных методов с целью оптимизации химико-технологических процессов.
12. Понятие методов Ньютона-Рафсона и Левенберга — Марквардта. Примеры применения данных методов с целью оптимизации химико-технологических процессов.
13. Понятие генетического алгоритма поиска локального минимума. Примеры применения данного алгоритма с целью генерации трехмерной структуры органических соединений.
14. Основные способы компьютерного описания изображений. Способы кодировки цвета.
15. Признаки, извлекаемые из изображений.
16. Регрессионные методы машинного обучения.
17. Деревья принятия решений.
18. Основные методы обработки изображений.
19. Понятие углов Харриса и алгоритм их обнаружения.
20. Понятие особых точек SIFT и способы их обнаружения.
21. Применение преобразования Фурье при обработке сигналов в спектроскопии ЯМР и ИК.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения	Контрольно-оценочные мероприятия
Профессиональное воспитание	профориентационная деятельность целенаправленная работа с информацией	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной	ОПК-2	Д-1	Домашняя работа Контрольная работа Лекции 10 Практические/семинарские занятия

			ПК-21	П-2 П-4	
--	--	--	-------	------------	--