ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ
Численные методы в химии

Код модуля	Модуль
1143762(1)	Информационные технологии и моделирование

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	физической и неорганической химии

Согласовано:

Управление образовательных программ Е.С. Комарова

Авторы:

- **Зуев Андрей Юрьевич, Профессор, физической и неорганической химии**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Численные методы в химии

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

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Численные методы в химии

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-4 -Способен решать задачи профессиональной деятельности с использованием информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности (Химическое материаловедение; Химия; Химия, физика и механика материалов)	Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области IT З-1 - Формулировать представления о роли современных информационно-коммуникационных технологий для решения задач профессиональной деятельности П-1 - Предлагать способы сбора, анализа и обработки информации по профилю деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий П-2 - Иметь опыт использования информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия

	У-1 - Обосновывать выбор современных IT-технологий для сбора, анализа, обработки и представления информации по профилю деятельности	
ОПК-5 -Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности (Химическое материаловедение; Химия; Химия, физика и механика материалов)	Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области IT З-1 - Сравнивать возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации П-1 - Предлагать пути решения задач по профилю деятельности, используя адекватное программное обеспечение У-1 - Осуществлять выбор адекватного программного обеспечения при решении задач по профилю деятельности	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия
ОПК-4 -Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности (Фундаментальная и прикладная химия)	Д-1 - Демонстрировать аналитические и системные умения, способность к поиску информации З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий и баз данных У-1 - Выбирать и использовать современные IT-технологии и базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия

	профессиональной деятельности	
ПК-2 -Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации (Химия)	З-1 - Перечислить экспериментальные методы и описать их техническое исполнение для решения конкретной научно-исследовательской задачи П-1 - Применять экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской задачи в выбранной области профессиональной деятельности У-1 - Выбирать экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской задачи в выбранной области профессиональной деятельности	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия
ПК-2 -Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации (Химия, физика и механика материалов)	З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения научно-исследовательских материаловедческих задач П-1 - Применять экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской материаловедческой задачи в выбранной области профессиональной деятельности У-1 - Выбирать экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия

	материаловедческой задачи в выбранной области профессиональной деятельности	
ПК-2 -Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации (Химическое материаловедение)	З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения научно-исследовательских материаловедческих задач П-1 - Применять экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской материаловедческой задачи в выбранной области профессиональной деятельности У-1 - Выбирать экспериментальные методы и технические средства (из набора имеющихся) для решения конкретной научно-исследовательской материаловедческой задачи в выбранной области профессиональной деятельности	Зачет Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия

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 – 0.1		
Текущая аттестация на лекциях	**Сроки – семестр, учебная неделя**	**Максимальная оценка в баллах**
контрольная работа	4,8	*100*
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 1.00		
Промежуточная аттестация по лекциям – нет		

Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – не предусмотрено		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.9		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	**Сроки – семестр, учебная неделя**	**Максимальная оценка в баллах**
контрольная работа	4,15	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 0.60		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–зачет **Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– 0.40**		
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. Методы численного решения алгебраического уравнения
2. Методы численного решения системы линейных алгебраических уравнений
3. Методы численного решения системы нелинейных алгебраических уравнений
4. Линейна регрессия
5. Нелинейная регрессия: полиномиальный анализ
6. Нелинейна регрессия: общий случай
7. Метод наименьших квадратов
8. Математическое моделирование физикохимических систем: прямая и обратная задачи
9. Оптимизация модели и ее численные алгоритмы: Гаусса-Ньютона, градиентного спуска, гибридный алгоритм Левенберга-Маркуарта

Примерные задания

Метод Ньютона решения алгебраического уравнения и блок-схема программы, реализующей метод

Метод секущих решения алгебраического уравнения и блок-схема программы, реализующей метод

Полиномиальный анализ экспериментальных данных и блок-схема программы, реализующей анализ

Расчет равновесного состава химической реакции методом минимизации функции Гиббса реакционной системы

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 № 1

Примерный перечень тем

1. Решение алгебраического уравнения и системы линейных уравнений

Примерные задания

1. Решить уравнение $x^2 - 2 = 0$ методом Ньютона.

2. Решить следующую систему уравнений методом Гаусса-Жордана.

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 = 2 \\ 2x_1 + x_2 - 3x_3 = -5 \\ -3x_1 - x_2 + 2x_3 = 1 \end{cases}$$

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Контрольная работа № 2

Примерный перечень тем

1. Определение коэффициентов полинома, наилучшим способом описывающего данные

Примерные задания

По данным (X-задаваемый параметр, Y- определяемое свойство)

X		0.23	2.29	2.87	4.15	5.36	5.51	6.36	6.84	7.0
Y		7.83	17.04	21.38	24.56	16.21	14.57	0.78	-7.64	-12.52

с использованием единичного взвешивания определить коэффициенты полиномов с максимальным показателем степени от 4 до 6 вместе с дисперсией адекватности и коэффициентом детерминации. Построить график сглаживающего полинома с минимальной дисперсией адекватности.

LMS-платформа – не предусмотрена

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

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Методы Ньютона и секущих решения алгебраического уравнения
2. Правило Крамера и итерационный метод Гаусса-Зейделя решения системы линейных уравнений
3. Метод решения системы линейных уравнений обращением матрицы коэффициентов
4. Метод решения системы нелинейных уравнений Ньютона-Рафсона
5. Линейная регрессия данных, определение минимума суммы квадратов отклонений, погрешностей параметров и коэффициента детерминации

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	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	ПК-2	У-1	Практические/семинарские занятия