



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кабардино-Балкарский государственный университет
им. Х.М. Бербекова»

Институт химии и биологии
Кафедра органической химии и высокомолекулярных соединений

СОГЛАСОВАНО
Руководитель образовательной
программы
 Р. Ч. Бажева
«26» БИОЛОГИИ 2023 г.

УТВЕРЖДАЮ
Директор института химии и
биологии
 Р. Ч. Бажева
«26» БИОЛОГИИ 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б1.В.ДВ.03.02 «Численные методы в химии и химической
технологии»**

Направление подготовки

18.04.01 – Химическая технология
(код и наименование направления подготовки)

Профиль подготовки

Химическая технология лекарственных средств
(наименование профиля подготовки)

Квалификация (степень) выпускника
Магистр

Форма обучения
очная

Нальчик 2023 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля) «Численные методы в химии и химической технологии» /сост. А.М. Алтуева – Нальчик: КБГУ, 2023. – 27с.

Рабочая программа дисциплины предназначена для студентов очной формы обучения, по направлению подготовки 18.04.01. «Химическая технология» 2 семестра, 1 курса.

Рабочая программа составлена с учетом Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 18.04.01. «Химическая технология», (уровень магистра), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации 7 августа 2020 года, № 910

Оглавление

1. Цели и задачи освоения дисциплины	4
2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО	4
3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины	5
4. Содержание и структура дисциплины (модуля).....	5
4.1 Структура дисциплины	7
4.2. Лекции по дисциплине.....	8
4.4 Практические занятия (семинары)	8
4.5 Курсовой проект (курсовая работа)	9
4.6 Самостоятельное изучение разделов дисциплины.....	9
5. Оценочные материалы для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.	9
Вопросы к курсу контролируемые компетенции ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2:	11
Критерии формирования оценок по контрольным точкам (контрольные работы; коллоквиум)...	13
Оценочные материалы для промежуточной аттестации.	14
Примерный перечень вопросов к экзамену.	14
6. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.....	14
6.1. Методические рекомендации для преподавателя.....	17
6.2. Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям.	18
6.3. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы.	18
6.4. Методические рекомендации по работе с литературой.....	20
7.1 Основная литература	21
7.2 Дополнительная литература	21
7.3 Интернет-ресурсы	22
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины.	23
ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ (ДОПОЛНЕНИЙ).....	26
Приложение.	27

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины «Численные методы анализа в химии и химической технологии» является формирование теоретических основ и выработка навыков использования методов математического моделирования в химии и химической технологии.

Задачи:

- формирование научного мышления, правильного понимания области и границ применимости вычислительных методов;
- овладение методами численного анализа, математической статистики и теории вероятностей;
- формирование алгоритмического подхода к решению прикладных вычислительных задач;
- выработка навыков решения задач в химии с использованием методов математического моделирования;
- освоение приемов обработки экспериментальных данных;
- выработка навыков работы с современным программным обеспечением, в том числе с алгоритмическими языками программирования (Turbo Pascal, Turbo Basic, Turbo C);
- закрепление практических навыков работы с ЭВМ.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина (модуль) относится к дисциплинам по выбору вариативной части Блока 1. Дисциплина (модуль) «Численные методы в химии и химической технологии» является дисциплиной по направлению подготовки **18.04.01 «Химическая технология» профиль подготовки: Химическая технология лекарственных средств (Б1.В.ДВ.03.02)**. Для успешного освоения этой дисциплины студенты должны знать основные теоретические положения следующих дисциплин:

- математика (основы линейной алгебры, дифференциальное и интегральное исчисление, основы теории вероятностей и математической статистики);

- информатика (общие навыки работы с персональным компьютером).

Дисциплина «Численные методы в химии и химической технологии» составляет основу теоретической и практической подготовки специалистов химиков по использованию математических методов в химии и химической технологии. Эта дисциплина используется при изучении других профессиональных дисциплин специальности:

- математическое моделирование химических процессов;
- статистические методы в химии;
- методы оптимизации химических процессов;
- химическая термодинамика;
- химическая кинетика;
- химия и физика высокомолекулярных соединений;

- химия твердого тела;
- электрохимия.

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП В **18.04.01 Химическая технология** по направлению подготовки (уровень магистратуры):

ПКС-1 - способен организовывать аналитический контроль этапов разработки лекарственных средств с заданными свойствами, управлять методами и средствами проведения исследований в соответствии с регламентом.

ПКС-1.1 - осуществляет управление технологическим процессом; проводит сверку сходимости баланса потребляемого сырья и выработки товарной продукции; рассчитывает планируемую потребность реагентов, материалов для производства лекарственных средств; эффективно и безопасно эксплуатирует оборудование; осуществляет входной и выходной контроль над сырьем и продукцией технологического объекта; пользуется производственно-технологической и нормативной документацией.

ПКС-1.2. Способен управлять методами и средствами проведения исследований, выявляет неисправности или отклонения от нормы в работе оборудования, причины этих неисправностей; предупреждает и устраняет нарушения хода производственного процесса; обеспечивает подготовку технологического оборудования к проверке.

Знать: физико-химические параметры основных технологических процессов органической химии, технические средства для измерения основных параметров технологического процесса, свойства сырья и продукции

Уметь: осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров технологического процесса.

Владеть: навыками контроля за осуществлением технологического процесса в соответствии с регламентом;

приемами применения численных методов и программирования для решения химических, химико-технологических задач;

изложение полученных результатов по результатам расчётов.

4. Содержание и структура дисциплины (модуля).

Таблица 1 Содержание разделов дисциплины перечень оценочных средств и контролируемых компетенций

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	2	3		4
1	Введение	Специальные возможности MS Word для оформления научных текстов. Создание предметного указателя и оглавления. Рецензирование (исправления, примечания, версии). Слияние документов	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК
2	Приёмы оформления научных текстов	Математические формулы в научном тексте. Работа с <u>Microsoft Equation</u> Химические формулы в научном тексте. Конструирование структурных формул в ChemWin. Вставка объектов в документ Word. Построение графиков с помощью Advanced Grapher и их вставка в документ Word. Оцифровка готовых графиков.	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК
3	Элементы математической статистики	Статистические расчёты. Распределение вероятностей. Точечные и интервальные оценки параметров распределения (математическое ожидание, <u>дисперсия</u> , вероятность события)	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК,
4	Решение системы линейных уравнений	Линейная и нелинейная зависимость. Метод аппроксимации		К, РК,
5	Корреляция в химии	Корреляционный и регрессионный анализ /	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК

		основные понятия, простая регрессия, стандартная ошибка предсказания и проверка значимости коэффициента регрессии, коэффициент корреляции, критерии		
6	Решение системы линейных уравнений	Методы Гаусса, вычисление обратной матрицы. Условия устойчивости вычисления. Вычисление собственных значений и собственных векторов симметричной матрицы с помощью преобразования подобия. Нахождение собственного вектора методами обратной интеграции.	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК
7	Обработка данных методом среднего и методом наименьших квадратов. МНК.	Регрессия. Принцип максимального правдоподобия и метод наименьших квадратов. линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. Нелинейный МНК	ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2	К, РК

В графе 4 приводятся планируемые формы текущего контроля: защита лабораторных работ (ЛР), выполнение курсового проекта (КП), курсовой работы (КР), расчетно-графического задания (РГЗ), домашнего задания (ДЗ), написание реферата (Р), эссе (Э), коллоквиум (К), рубежный контроль (РК), тестирование (Т) и т.д.

4.1 Структура дисциплины

Таблица 2. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е. (144 часа)

Вид работы	Трудоемкость, часов	
	1 семестр	Всего
Общая трудоемкость (в часах)	144	144
Контактная работа (в часах):	51	51
<i>Лекционные занятия (Л)</i>	17	17

<i>Практические и семинарские занятия (ПЗ)</i>	34	34
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	-	-
<i>Самостоятельная работа (в часах):</i>	66	66
Расчетно-графическое задание (РГЗ)	-	-
Реферат (Р)	-	-
Эссе (Э)	-	-
Контрольная работа (К)	-	-
Самостоятельное изучение разделов/тем	66	66
Курсовая работа (КР)/Курсовой проект (КП)	-	-
Вид промежуточной аттестации (экзамен)	27	27

4.2. Лекции по дисциплине

Таблица 3. Темы лекции

№ Раздела	Наименование разделов
1	2
1	Введение
2	Приемы оформления научных текстов
3	Математической статистики
4	Основные методы приближенного решения уравнений и их систем
5	Линейные и нелинейные зависимости
6	Численное интегрирование дифференциальных уравнений
7	Корреляционный анализ
8	Регрессия. Принцип максимального правдоподобия и метод наименьших квадратов. Линейная и нелинейная регрессия.
9	Статистические методы обработки экспериментальных данных.
	Итого:

4.3 Лабораторные работы

Учебным планом не предусмотрен.

4.4 Практические занятия (семинары)

Таблица 4. Практические занятия (семинарские занятия)

№ Занятия	№ раздела	Тема
1	2	3
1	1	Введение
2	2	Приемы оформления научных текстов
3	3	Математической статистики
4	4	Линейные и нелинейные зависимости

5	5	Корреляционный анализ
6	6	Регрессия. Регрессионный анализ
7	7	Обработка экспериментальных данных
		Всего:

4.5 Курсовой проект (курсовая работа)

Учебным планом не предусмотрен.

4.6 Самостоятельное изучение разделов дисциплины

№ раздела	Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение
1	2
1	Введение в численные методы. Работа с литературой. Решение задач Подготовка к практическим занятиям по вопросам, предложенным преподавателем Подготовка реферата
2	Основы программирования
3	Приближённые значения величин. Источники погрешностей. Классификация погрешностей.
4	Абсолютная и относительная погрешности. Правила округления чисел. Погрешности выполнения действий над приближёнными числами..
5	Элементы теории вероятностей: понятие вероятности, свойства вероятности, основные правила теории вероятностей и их следствия, законы распределения дискретных и непрерывных случайных величин, функции распределения, числовые характеристики случайных величин.
6.	Корреляционный анализ.
7.	Обработка экспериментальных данных.

5. Оценочные материалы для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Конечными результатами освоения программы дисциплины являются сформированные когнитивные дескрипторы «знать», «уметь», «владеть», расписанные по отдельным компетенциям. Формирование этих дескрипторов происходит в течение всего семестра по этапам в рамках различного вида занятий и самостоятельной работы.

В ходе изучения дисциплины предусматриваются *текущий, рубежный контроль и промежуточная аттестация*.

Оценочные материалы для текущего контроля. Цель текущего контроля – оценка результатов работы в семестре и обеспечение своевременной обратной связи, для коррекции обучения, активизации самостоятельной работы обучающегося. Объектом текущего контроля

являются конкретизированные результаты обучения (учебные достижения) по дисциплине

Оценочные материалы для рубежного контроля. Рубежный контроль осуществляется по более или менее самостоятельным разделам – учебным модулям курса и проводится по окончании изучения материала модуля в заранее установленное время. Рубежный контроль проводится с целью определения качества усвоения материала учебного модуля в целом. В течение семестра проводится три контрольных мероприятия по графику.

Распределение баллов текущего и рубежного контроля

№п/п	Вид контроля	Сумма баллов			
		Общая сумма	1-я точка	2-я точка	3-я точка
1-	Посещение занятий	до 10 баллов	до 3 б.	до 3б.	до 4б.
2-	Текущий контроль:	до 30 баллов	до 10 б.	до 10 б.	до 10 б.
	Ответ на 5 вопросов	от 0 до 15 б.	от 0 до 5 б.	от 0 до 5 б.	от 0 до 5 б.
	Полный правильный ответ	до 15 баллов	5 б.	5 б.	5 б.
	Неполный правильный ответ	от 3 до 15 б.	от 1 до 5 б.	от 1 до 5 б.	от 1 до 5 б.
	Ответ, содержащий неточности, ошибки	0б.	0б.	0б.	0б.
	Выполнение самостоятельных заданий (решение задач, написание рефератов, доклад, эссе)	от 0 до 15 б.	от 0 до 5 б.	от 0 до 5 б.	от 0 до 5 б.
1.	Рубежный контроль	до 30 баллов	до 10 б.	до 10 б.	до 10 б.
	тестирование	от 0- до 12б.	от 0- до 4б.	от 0- до 4б.	от 0- до 4б.
	коллоквиум	от 0 до 18б.	от 0 до 6 б.	от 0 до 6 б.	от 0 до 6 б.
	Итого сумма текущего и рубежного контроля	до 70баллов	до 23б.	до 23б.	до 24б.
	Первый этап (базовый)уровень) – оценка «удовлетворительно»	не менее 36 б.	не менее 12 б.	не менее 12 б.	не менее 12 б.
	Второй этап (продвинутый)уровень) – оценка «хорошо»	менее 70 б. (51-69 б.)	менее 23 б.	менее 23 б.	менее 24б.
	Третий этап (высокий уровень) - оценка «отлично»	не менее 70 б.	не менее 23 б.	не менее 23 б.	не менее 24б.

В качестве форм рубежного контроля можно использовать тестирование (письменное или компьютерное), проведение коллоквиума или контрольных работ. Выполняемые работы должны храниться на кафедре течения учебного года и по требованию предоставляться в Управление контроля качества. На

рубежные контрольные мероприятия рекомендуется выносить весь программный материал (все разделы) по дисциплине.

Текущий контроль успеваемости обеспечивает оценивание хода освоения дисциплины включает: ответы на теоретические вопросы на практическом занятии, решение практических задач и выполнение заданий на практическом занятии, самостоятельное выполнение индивидуальных домашних заданий (например, решение задач) с отчетом (защитой) в установленный срок, написание докладов, рефератов, эссе, дискуссии.

Оценка качества подготовки на основании выполненных заданий ведется преподавателем (с обсуждением результатов), баллы начисляются в зависимости от сложности задания

Средства (фонд оценочных средств) оценки текущей успеваемости и промежуточной аттестации студентов по итогам освоения дисциплины представляют собой комплект контролирующих материалов следующих видов:

- программные вопросы самоподготовки. Представляют собой короткие задания в тестовом виде (вопрос-ответ). Проверяются знания текущего материала: уравнения, формулировки законов, основные понятия и определения. Самостоятельные работы проводятся на лабораторных занятиях в течение 5-10 минут.

- вопросы к коллоквиумам. Представляют собой задания по темам курса. Проверяются знания теоретического лекционного материала, тем, вынесенных на самостоятельную проработку, знание и понимание методик проведения экспериментальных исследований, умения применять теоретические знания для конкретных реакций и процессов. Опросы проводятся на лабораторных занятиях.

- вопросы к контрольным работам. Представляют перечень вопросов по основным разделам курса. Проверяется степень усвоения теоретических и практических знаний, приобретенных умений на репродуктивном и продуктивном уровне.

- вопросы к зачету. Разработанные контролирующие материалы позволяют оценить усвоения теоретических и практических знаний, приобретенных умений на продуктивном уровне, и способствуют формированию профессиональных и общекультурных компетенций студентов.

Вопросы к курсу контролируемые компетенции ПКС-1, ПКС-1.1, ПКС-1.2:

1. Оформление научных текстов

Текстовый редактор Word. Ввод, редактирование, шрифтовое оформление текста. Форматирование абзаца. Создание списков. Вставка специальных символов и графических объектов. Типы графических объектов и их создание. Графический редактор Paint.

Форматирование документа (колонки, колонтитулы, нумерация страниц). Создание и редактирование таблиц. Работа со ссылками, сносками,

закладками. Создание предметного указателя и оглавления. Проверка орфографии. Рецензирование (исправления, примечания, версии). Слияние документов.

Математические формулы в научном тексте. Работа с Microsoft Equation. Химические формулы в научном тексте. Конструирование структурных формул в ISIS/Draw. Вставка объектов в Word. Построение графиков с помощью Advanced Grapher.

2. Математические расчёты в химии

Системы компьютерной математики. Решение задач в среде Mathima. Числовые расчёты. Задание функций, матриц, переменных. Построение графиков. Символические операции (упрощение выражений, дифференцирование, интегрирование).

Элементы программирования в Mathima. Численные методы в среде Mathima. Решение нелинейных уравнений. Отделение корней. Методы половинного деления (дихотомии), хорд, касательных (Ньютона), итерации. Достижение требуемой точности.

Решение систем линейных уравнений. Задание систем. Прямые методы (Крамера, обращения матрицы, Гаусса—Жордана). Итерационные методы (метод Гаусса—Зейделя).

Численное интегрирование. Квадратурные формулы с равноотстоящими узлами: прямоугольников, трапеций, парабол (Симпсона), общая формула Ньютона—Котеса. Квадратурные формулы с произвольными узлами. Численное интерполирование и дифференцирование. Линейное интерполирование, метод Ньютона, сплайны.

Решение систем дифференциальных уравнений. Методы Эйлера, прогноза и коррекции, Рунге—Кутты.

Линейное программирование. Постановка задачи. Методы решения. Симплекс-метод. Геометрическое представление.

Статистические расчёты в Mathima. Распределение вероятностей. Точечные и интервальные оценки параметров распределения (математическое ожидание, дисперсия, вероятность события). Проверка статистических гипотез. Дисперсионный анализ.

Регрессионный анализ. Принцип максимального правдоподобия и метод наименьших квадратов. Линейная и нелинейная регрессия.

Критерии формирования оценок (оценивания) устного опроса

Устный опрос является одним из основных способов учёта знаний обучающегося по дисциплине «Численный анализ в химии и химической технологии». Развёрнутый ответ студента должен представлять собой связное, логически последовательное сообщение на заданную тему, показывать его умение применять технологические методы.

В результате устного опроса знания, обучающегося оцениваются по следующей шкале:

3 баллов, ставится, если обучающийся:

- 1) полно излагает изученный материал, даёт правильное определенное экономических понятий;
- 2) обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только по учебнику, но и самостоятельно составленные;
- 3) излагает материал последовательно и правильно с точки зрения норм литературного языка.

2 балла, ставится, если обучающийся даёт ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для балла «1», но допускает 1-2 ошибки, которые сам же исправляет, и 1-2 недочёта в последовательности и языковом оформлении излагаемого.

1 балла, ставится, если обучающийся обнаруживает знание и понимание основных положений данной темы, но:

- 1) излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий;
- 2) не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры;
- 3) излагает материал непоследовательно и допускает ошибки в языковом оформлении излагаемого.

0 баллов, ставится, если обучающийся обнаруживает незнание большей части соответствующего раздела изучаемого материала, допускает ошибки в формулировке.

Баллы «3», «2», «1» могут ставиться не только за единовременный ответ, но и за рассредоточенный во времени, т.е. за сумму ответов, данных студентом на протяжении занятия.

Критерии формирования оценок по контрольным точкам (контрольные работы; коллоквиум)

8 - баллов - ставится за работу, выполненную полностью без ошибок и недочетов; обучающийся демонстрирует знание теоретического и практического материала по теме практически на 100%;

6 – ставится за полные ответы на вопросы, но при наличии в ней не более одной негрубой ошибки и одного недочета, не более трех недочетов. Обучающийся демонстрирует знание теоретического и практического материала по теме, допуская незначительные неточности при технологических решениях;

4 балла – ставится за работу, если магистр правильно ответил не менее 2/3 всех вопросов или допустил не более одной грубой ошибки и двух недочетов, не более одной грубой и одной негрубой ошибки, не более трех негрубых ошибок, одной негрубой. Обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной технологической задачи, дает неполный ответ;

менее 2 баллов – ставится за ответы на вопросы, если число ошибок и недочетов превысило норму для оценки 3 или правильные ответы менее 2/3 всех заданных вопросов. Обучающийся дает неверную оценку технологического

процесса.

Оценочные материалы для промежуточной аттестации.

Целью промежуточных аттестаций по дисциплине является оценка качества освоения дисциплины обучающимися.

Промежуточная аттестация предназначена для объективного подтверждения и оценивания достигнутых результатов обучения после завершения изучения дисциплины. Осуществляется в конце семестра и представляет собой итоговую оценку знаний по дисциплине «Нанотехнологии в фармации» в виде проведения экзамена.

Промежуточная аттестация может проводиться в устной, письменной форме, и в форме тестирования. На промежуточную аттестацию отводится до 30 баллов.

Примерный перечень вопросов к экзамену.

1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.
2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.
3. Укажите на различие подходов математики и компьютерной химии при описании химических явлений.
4. Что такое математическая модель химического явления? Дайте определение и назовите свойства.
5. Назовите способы использования математических методов и информационных технологий в химии.
6. Опишите алгоритмы применения метода наименьших квадратов для спектрофотометрического анализа состава сложных смесей.
7. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.
8. Что такое «аналитические длины волн» в спектрофотометрическом методе анализа?
9. Почему метод Симпсона точнее метода прямоугольных трапеций ?
10. Что такое «фармакологическая химия», и как она связана с компьютерной химией?
11. Что такое поверхность потенциальной энергии для химической реакции? Почему она существует?
12. Что такое условная оптимизация?
13. Почему метод множителей Лагранжа иногда называют методом «штрафов»? В чем суть этого метода?

6. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Максимальная сумма (100 баллов), набираемая студентом по дисциплине включает две составляющие:

– *первая составляющая* – оценка регулярности, своевременности и качества выполнения студентом учебной работы по изучению дисциплины в

течение периода изучения дисциплины (семестра, или нескольких семестров) (сумма – не более 70 баллов). Баллы, характеризующие успеваемость студента по дисциплине, набираются им в течение всего периода обучения за изучение отдельных тем и выполнение отдельных видов работ.

– *вторая составляющая* – оценка знаний студента по результатам промежуточной аттестации (не более 30 –баллов).

Общий балл текущего и рубежного контроля складывается из следующих составляющих приложение 2. В течение учебного процесса студент обязан отчитаться по теоретическому материалу и практическим занятиям: опросы, индивидуальные задания.

Целью промежуточных аттестаций по дисциплине является оценка качества освоения дисциплины обучающимися.

Критерии оценки качества освоения дисциплины

Оценка «отлично» – от 91 до 100 баллов – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы. Все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному. На экзамене студент демонстрирует глубокие знания предусмотренного программой материала, умеет четко, лаконично и логически последовательно отвечать на поставленные вопросы.

Оценка «хорошо» – от 81 до 90 баллов – теоретическое содержание курса освоено, необходимые практические навыки работы сформированы, выполненные учебные задания содержат незначительные ошибки. На экзамене студент демонстрирует твердые знания основного (программного) материала, умеет четко, грамотно, без существенных неточностей отвечать на поставленные вопросы.

Оценка «удовлетворительно» – от 61 до 80 баллов – теоретическое содержание курса освоено не полностью, необходимые практические навыки работы сформированы частично, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки. На экзамене студент демонстрирует знание только основного материала, ответы содержат неточности, слабо аргументированы, нарушена последовательность изложения материала

Оценка «неудовлетворительно» – от 36 до 60 баллов – теоретическое содержание курса не освоено, необходимые практические навыки работы не сформированы, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к существенному повышению качества выполнения учебных заданий. На экзамене студент демонстрирует незнание значительной части программного материала, существенные ошибки в ответах на вопросы, неумение ориентироваться в материале, незнание основных понятий дисциплины.

В соответствии с рейтинговой системой текущий контроль производится три раза в течение семестра путем балльной оценки качества усвоения теоретического материала (ответы на вопросы) и результатов

практической деятельности (решение задач, выполнение заданий, решение проблем).

Промежуточная аттестация (экзамен) производится в конце семестра также путем балльной оценки. Итоговый рейтинг определяется суммированием баллов текущей оценки в течение семестра и баллов промежуточной аттестации в конце семестра по результатам экзамена. Максимальный итоговый рейтинг соответствует 100 баллам (60 – текущая оценка в семестре, 40 – промежуточная аттестация в конце семестра).

Оценка результатов самостоятельной работы организуется как единство двух форм: самоконтроль и контроль со стороны преподавателя.

Самоконтроль зависит от определенных качеств личности, ответственности за результаты своего обучения, заинтересованности в положительной оценке своего труда, материальных и моральных стимулов, от того насколько обучаемый мотивирован в достижении наилучших результатов. Задача преподавателя состоит в том, чтобы создать условия для выполнения самостоятельной работы (учебно-методическое обеспечение), правильно использовать различные стимулы для реализации этой работы (рейтинговая система), повышать ее значимость и грамотно осуществлять контроль самостоятельной деятельности студента (фонд оценочных средств).

Критерии формирования оценок по промежуточной аттестации:

«отлично» (____ баллов) – получают обучающиеся, которые свободно ориентируются в материале и отвечают без затруднений. Обучающийся способен к выполнению сложных заданий, постановке целей и выборе путей их реализации. Работа выполнена полностью без ошибок, решено 100% задач;

«хорошо» (____ балла) – получают обучающиеся, которые относительно полно ориентируются в материале, отвечают без затруднений, допускают незначительное количество ошибок. Обучающийся способен к выполнению сложных заданий. Работа выполнена полностью, но имеются не более одной негрубой ошибки и одного недочета, не более трех недочетов. Допускаются незначительные неточности при решении задач, решено 70% задач;

«удовлетворительно» (____ баллов) – получают обучающиеся, у которых недостаточно высок уровень владения материалом. В процессе ответа на экзамене допускаются ошибки и затруднения при изложении материала. Обучающийся правильно выполнил не менее 2/3 всей работы или допустил не более одной грубой ошибки и двух недочетов, не более одной грубой и одной негрубой ошибки, не более трех негрубых ошибок, одной негрубой. Обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, дает неполный ответ, решено 55% задач;

«неудовлетворительно» (____ баллов) – получают обучающиеся, которые допускают значительные ошибки. Обучающийся имеет лишь начальную степень ориентации в материале. В работе число ошибок и недочетов превысило норму для оценки 3 или правильно выполнено менее 2/3 всей работы. Обучающийся дает неверную оценку ситуации, решено менее 50% задач.

Результаты обучения (компетенции)	Основные показатели оценки результатов обучения	Вид оценочного материала
<p>ПКС-1 Способен организовывать аналитический контроль этапов разработки лекарственных средств с заданными свойствами, управлять методами и средствами проведения исследований</p> <p>ПКС-1.1 Способен организовывать аналитический контроль этапов разработки лекарственных средств с заданными свойствами</p> <p>ПКС-1.2 Способен управлять методами и средствами проведения исследований при разработке лекарственных средств</p>	<p>Владеет: основами численных методов и программирования; приемами применения численных методов и программирования для решения полимерно-химических задач; навыками письменного изложения выводов по результатам расчётов.</p> <p>Умеет: работать с компьютером на уровне пользователя и способен применять навыки работы с компьютерами, как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности; проводить математические расчёты (включая программирование) при решении полимерно-химических задач, оформлять учебные и научные тексты по специальности (курсовые работы, рефераты, тезисы) по результатам расчётов,</p> <p>Знает: основные численные методы и приёмы программирования для решения полимерно-химических задач, типы задач, для которых необходимо применение численных методов и программирования; стандарты и приёмы оформления учебных и научных текстов по результатам расчётов (рефератов, тезисов)</p>	<p>Устный опрос на практических занятиях</p> <p>Проверка выполняемых работ</p> <p>Защита выполняемых работ</p> <p>экзамен</p>

6.1. Методические рекомендации для преподавателя

Лекция – главное звено дидактического цикла обучения. Её цель закладка фундамента для последующего усвоения студентами материала методом самостоятельной работы. Содержание лекций должно отвечать следующим дидактическим требованиям:

- Изложение материала от простого к сложному, от известного к неизвестному;
- Логичность, чёткость и ясность в изложении материала;
- Возможность проблемного изложения, дискуссии, диалога с целью активизации деятельности студентов;
- Опора смысловой части лекции на подлинные факты, явления;
- Тесная связь излагаемого материала и выводов с будущей профессиональной деятельностью студентов.

Преподаватель читающий лекционные курсы должен использовать существующие в педагогической науке варианты лекций и находить их место

в структуре процесса обучения учитывая дидактические и воспитательные возможности.

При чтении лекций важно помнить, что основная информация передаётся через интонацию. Учитывать, что первый кризис внимания студентов наступает на 15-20 минутах, второй – на 30-35 минутах. Лектор должен исходить из того, что восприятие лекций студентами младших и старших курсов отличаются по готовности и умению.

Необходимо развивать различные формы самостоятельной работы студентов и постоянно обучать их методам такой работы. Задание на самостоятельную работу студенты должны получать в начале семестра, определив сроки их выполнения и сдачи. Основным методом проведения самостоятельной работы студента заключаются в работе с текстом специальной литературы – учебниками, брошюрами, специализированными журналами. Формами организации контроля над самостоятельной работой студента осуществляется с помощью коллоквиума, тестирования.

6.2. Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям.

Практические (семинарские) занятия – составная часть учебного процесса, групповая форма занятий при активном участии студентов. Практические занятия способствуют углубленному изучению наиболее сложных проблем науки и служат основной формой подведения итогов самостоятельной работы обучающихся. Целью практических занятий является углубление и закрепление теоретических знаний, полученных обучающимися на лекциях и в процессе самостоятельного изучения учебного материала, а, следовательно, формирование у них определенных умений и навыков.

В ходе подготовки к семинарскому занятию необходимо прочитать конспект лекции, изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, выполнить выданные преподавателем практические задания. При этом учесть рекомендации преподавателя и требования программы. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы.

Желательно при подготовке к практическим занятиям по дисциплине одновременно использовать несколько источников, раскрывающих заданные вопросы.

На практических занятиях обучающиеся учатся грамотно излагать проблемы, свободно высказывать свои мысли и суждения, рассматривают ситуации, способствующие развитию профессиональной компетентности. Следует иметь в виду, что подготовка к практическому занятию зависит от формы, места проведения семинара, конкретных заданий и поручений. Это может быть написание доклада, эссе, реферата (с последующим их обсуждением), коллоквиум.

6.3. Методические рекомендации по организации самостоятельной

работы.

Самостоятельная работа (по В.И. Далу «самостоятельный – человек, имеющий свои твердые убеждения») осуществляется при всех формах обучения: очной и заочной.

Самостоятельная работа обучающихся - способ активного, целенаправленного приобретения студентом новых для него знаний и умений без непосредственного участия в этом процесса преподавателей. Повышение роли самостоятельной работы обучающихся при проведении различных видов учебных занятий предполагает:

- оптимизацию методов обучения, внедрение в учебный процесс новых технологий обучения, повышающих производительность труда преподавателя, активное использование информационных технологий, позволяющих обучающемуся в удобное для него время осваивать учебный материал;
- широкое внедрение компьютеризированного тестирования;
- совершенствование методики проведения практик и научно-исследовательской работы обучающихся, поскольку именно эти виды учебной работы в первую очередь готовят обучающихся к самостоятельному выполнению профессиональных задач;
- модернизацию системы курсового и дипломного проектирования, которая должна повышать роль студента в подборе материала, поиске путей решения задач.

Самостоятельная работа приводит студента к получению нового знания, упорядочению и углублению имеющихся знаний, формированию у него профессиональных навыков и умений. Самостоятельная работа выполняет ряд функций:

- ✓ развивающую;
- ✓ информационно-обучающую;
- ✓ ориентирующую и стимулирующую;
- ✓ воспитывающую;
- ✓ исследовательскую.

В рамках курса выполняются следующие виды самостоятельной работы:

1. Проработка учебного материала (по конспектам, учебной и научной литературе);
2. Выполнение разноуровневых задач и заданий;
3. Работа с тестами и вопросами для самопроверки;
4. Выполнение итоговой контрольной работы.

Студентам рекомендуется с самого начала освоения курса работать с литературой и предлагаемыми заданиями в форме подготовки к очередному аудиторному занятию. При этом актуализируются имеющиеся знания, а также создается база для усвоения нового материала, возникают вопросы, ответы на которые студент получает в аудитории.

6.4. Методические рекомендации по работе с литературой

Всю литературу можно разделить на учебники и учебные пособия, оригинальные научные монографические источники, научные публикации в периодической печати. Из них можно выделить литературу основную (рекомендуемую), дополнительную и литературу для углубленного изучения дисциплины.

Изучение дисциплины следует начинать с учебника, поскольку учебник – это книга, в которой изложены основы научных знаний по определенному предмету в соответствии с целями и задачами обучения, установленными программой.

При работе с литературой необходимо учитывать, что имеются различные виды чтения, и каждый из них используется на определенных этапах освоения материала.

Предварительное чтение направлено на выявление в тексте незнакомых терминов и поиск их значения в справочной литературе. В частности, при чтении указанной литературы необходимо подробнейшим образом анализировать понятия.

Сквозное чтение предполагает прочтение материала от начала до конца. Сквозное чтение литературы из приведенного списка дает возможность студенту сформировать свод основных понятий из изучаемой области и свободно владеть ими.

Выборочное – наоборот, имеет целью поиск и отбор материала. В рамках данного курса выборочное чтение, как способ освоения содержания курса, должно использоваться при подготовке к практическим занятиям по соответствующим разделам.

Аналитическое чтение – это критический разбор текста с последующим его конспектированием. Освоение указанных понятий будет наиболее эффективным в том случае, если при чтении текстов студент будет задавать к этим текстам вопросы. Часть из этих вопросов сформулирована в ФОС в перечне вопросов для собеседования. Перечень этих вопросов ограничен, поэтому важно не только содержание вопросов, но сам принцип освоения литературы с помощью вопросов к текстам.

Целью *изучающего* чтения является глубокое и всестороннее понимание учебной информации. Есть несколько приемов изучающего чтения:

1. Чтение по алгоритму предполагает разбиение информации на блоки: название; автор; источник; основная идея текста; фактический материал; анализ текста путем сопоставления имеющихся точек зрения по рассматриваемым вопросам; новизна.

2. Прием постановки вопросов к тексту имеет следующий алгоритм:

- медленно прочитать текст, стараясь понять смысл изложенного;
- выделить ключевые слова в тексте;
- постараться понять основные идеи, подтекст и общий замысел автора.

3. Прием тезирования заключается в формулировании тезисов в виде положений, утверждений, выводов.

К этому можно добавить и иные приемы: прием реферирования, прием комментирования.

Важной составляющей любого солидного научного издания является список литературы, на которую ссылается автор. При возникновении интереса к какой-то обсуждаемой в тексте проблеме всегда есть возможность обратиться к списку относящейся к ней литературы. В этом случае вся проблема как бы разбивается на составляющие части, каждая из которых может изучаться отдельно от других. При этом важно не терять из вида общий контекст и не погружаться чрезмерно в детали, потому что таким образом можно не увидеть главного.

Подготовка к экзамену должна проводиться на основе лекционного материала, материала практических занятий с обязательным обращением к основным учебникам по курсу. Это позволит исключить ошибки в понимании материала, облегчит его осмысление, прокомментирует материал многочисленными примерами.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1 Основная литература

1. Калиткин Н. Н. Численные методы: учеб. пособие. — 2-е изд., исправленное. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011. — 592 с.: ил. — (Учебная литература для вузов).
2. Численные методы: учеб. Пособие/; Моск. гос. ун-т. — 4-е изд. — М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2006. — 636 с. (Классический университетский учебник).
3. Джонсон. К. Численные методы в химии/Пер. с англ.-М.: Мир. 1983.- 503с.
4. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. (Серия "Библиотека студента")-М.: СОЛОН-Пресс, 2005. — 536 с.
5. Зеленцов С.В. Математические методы в химии. Учебное пособие. — Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2019 - 102 с.

7.2 Дополнительная литература

1. Численные методы в задачах и упражнениях: учеб. пособие /— М.: Высш. шк., 2000. — 189 с.
2. Волков методы. — М.: Лань, 2004. — 256 с.
3. Рычков В., Дьяконов В., Новиков Ю. Компьютер для студента. — Самоучитель. СПб.: Питер, 20с.
4. Компьютер для студентов. Самоучитель: Учеб. пособ. — М.: ТРИУМФ, 20с.
5. Самарский в численные методы. — М.: Лань, 2009. — 288 с.

7.3 Интернет-ресурсы

1. Справочная правовая система «Гарант». URL: <http://www.garant.ru>.
2. Справочная правовая система «КонсультантПлюс». URL: <http://www.consultant.ru>

– к современным профессиональным базам данных:

№п/п	Наименование электронного ресурса	Краткая характеристика	Адрес сайта	Условия доступа
1.	ЭБД РГБ	Электронные версии 885898 полных текстов диссертаций и авторефератов из фонда Российской государственной библиотеки	http://www.diss.rsl.ru	Авторизованный доступ из библиотеки (к. 112-113)
2.	«Web of Science» (WOS)	Авторитетная политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая база данных, в которой индексируются около 12,5 тыс. журналов	http://www.isiknowledge.com/	Доступ по IP-адресам КБГУ
3.	Sciverse Scopus издательства «Эльзевир. Наука и технологии»	Реферативная и аналитическая база данных, содержащая 21.000 рецензируемых журналов; 100.000 книг; 370 книжный серий (продолжающихся изданий); 6,8 млн. докладов из трудов конференций	http://www.scopus.com	Доступ по IP-адресам КБГУ
4.	Научная электронная библиотека (НЭБ РФФИ)	Электронная библиотека научных публикаций - полнотекстовые версии около 4000 иностранных и 3900 отечественных научных журналов, рефераты публикаций 20 тысяч журналов, а также описания 1,5 млн. зарубежных и российских диссертации.	http://elibrary.ru	Полный доступ

		2800 российских журналов на безвозмездной основе		
5.	База данных Science Index (РИНЦ)	Национальная информационно-аналитическая система, аккумулирующая более 6 миллионов публикаций российских авторов, а также информацию об их цитировании из более 4500 российских журналов.	http://elibrary.ru	Авторизованный доступ. Позволяет дополнять и уточнять сведения о публикациях ученых КБГУ, имеющихся в РИНЦ
6.	Национальная электронная библиотека РГБ	Объединенный электронный каталог фондов российских библиотек, содержащий 4331542 электронных документов образовательного и научного характера по различным отраслям знаний	https://нэб.рф	Доступ с электронного читального зала библиотеки КБГУ

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

Минимально необходимый для реализации ОПОП перечень материально-технического обеспечения включает в себя: лекционные аудитории (оборудованные видеопроекционным оборудованием для презентаций, средствами звуковоспроизведения, экраном и имеющие выход в сеть Интернет), помещения для проведения семинарских и практических занятий (оборудованные учебной мебелью), компьютерные классы и др. *(в соответствии с ФГОС, учебным планом и справки МТО).*

По дисциплине «Численные методы в химии и химической технологии» имеется презентация по отдельным темам курса, позволяющая наиболее эффективно освоить представленный учебный материал.

При проведении занятий лекционного типа, семинарских занятий используются:

лицензионное программное обеспечение:

- Продукты Microsoft (Desktop EducationALNG LicSaPk OLVS Academic Edition Enterprise) подписка (Open Value Subscription) № V 2123829;
- Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security Стандартный Russian Edition № лицензии 17E0-180427-050836-287-197;
- AltLinux (Альт Образование 8) № AAA.0252.00;

свободно распространяемые программы:

- Academic MarthCAD License - математическое программное обеспечение, которое позволяет выполнять, анализировать важнейшие инженерные расчеты и обмениваться ими;

- WinZip для Windows - программ для сжатия и распаковки файлов;
- Adobe Reader для Windows – программа для чтения PDF файлов;
- Far Manager - консольный файловый менеджер для операционных систем семейства Microsoft Windows.

8.1. Особенности реализации дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.

Для студентов с ограниченными возможностями здоровья созданы специальные условия для получения образования. В целях доступности получения высшего образования по образовательным программам инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья университетом обеспечивается:

1. Альтернативная версия официального сайта в сети «Интернет» для слабовидящих;

2. Для инвалидов с нарушениями зрения (слабовидящие, слепые)

- присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь, дублирование вслух справочной информации о расписании учебных занятий; наличие средств для усиления остаточного зрения, брайлевской компьютерной техники, видеоувеличителей, программ невизуального доступа к информации, программ-синтезаторов речи и других технических средств приема-передачи учебной информации в доступных формах для студентов с нарушениями зрения;

- задания для выполнения на экзамене зачитываются ассистентом;

- письменные задания выполняются на бумаге, надиктовываются ассистенту обучающимся;

3. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху (слабослышащие, глухие):

- на зачете/экзамене присутствует ассистент, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (он помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе записывая под диктовку);

- зачет/экзамен проводится в письменной форме;

4. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, созданы материально-технические условия, обеспечивающие возможность беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, объекты питания, туалетные и другие помещения университета, а также пребывания в указанных помещениях (наличие расширенных дверных проемов, поручней и других приспособлений).

- письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;

- по желанию студента экзамен проводится в устной форме.

Обучающиеся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья обеспечены электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ (ДОПОЛНЕНИЙ)

в рабочую программу по дисциплине «Численные методы в химии и химической технологии» направления подготовки 18.04.01 – Химическая технология; Профиль «Химическая технология лекарственных средств» на 2023-2024 учебный год

№п/п	Элемент (пункт) РПД	Перечень вносимых изменений (дополнений)	Примечание

Обсуждена и рекомендована на заседании кафедры органической химии и ВМС протокол № ____ от " ____ " _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой _____ Ю.А. Малкандуев
подпись, расшифровка подписи, дата

Приложение.

Шкала оценивания планируемых результатов обучения

Текущий и рубежный контроль

Семестр	Шкала оценивания			
	0-35 баллов	36-50 баллов	51-60 баллов	56-70 баллов
	<p>Частичное посещение аудиторных занятий. Неудовлетворительное выполнение лабораторных и практических работ. Плохая подготовка к балльно-рейтинговым мероприятиям. Студент не допускается к промежуточной аттестации</p>	<p>Полное или частичное посещение аудиторных занятий. Частичное выполнение и защита лабораторных и практических работ. Выполнение контрольных работ, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценки «удовлетворительно».</p>	<p>Полное или частичное посещение аудиторных занятий. Полное выполнение и защита лабораторных и практических работ. Выполнение контрольных работ, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценки «хорошо».</p>	<p>Полное посещение аудиторных занятий. Полное выполнение и защита лабораторных и практических занятий. Выполнение контрольных работ, тестовых заданий, ответы на коллоквиуме на оценки «отлично».</p>

(для зачёта)

Семестр	Шкала оценивания	
	Незачтено (36-60)	Зачтено (61-70)
	<p>Студент имеет 36-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на зачёте не ответил ни на один вопрос.</p>	<p>Студент имеет 36-45 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на зачете представил полный ответ на один вопрос и частично (полностью) ответил на второй.</p> <p>Студент имеет 46-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на зачете дал полный ответ на один вопрос или частично ответил на оба вопроса.</p> <p>Студенту, имеющему 61-70 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, выставляется отметка «зачтено» без сдачи зачёта.</p>

Промежуточная аттестация (для экзамена и диф. зачёта)
(в случае, если экзаменационный билет содержит два вопроса)

Семестр	Шкала оценивания			
	Неудовлетворительно (36-60 баллов)	Удовлетворительно (61-80 баллов)	Хорошо (81-90 баллов)	Отлично (91-100 баллов)
	<p>Студент имеет 36-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) не дал полного ответа ни на один вопрос.</p> <p>Студент имеет 36-45 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ только на один вопрос</p>	<p>Студент имеет 36-50 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ на один вопрос и частично (полностью) ответил на второй.</p> <p>Студент имеет 46-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ на один вопрос или частично ответил на оба вопроса.</p> <p>Студент имеет по итогам текущего и рубежного контроля 61-70 баллов на экзамене (диф. зачете) не дал полного ответа ни на один вопрос.</p>	<p>Студент имеет 51-60 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ на один вопрос и частично (полностью) ответил на второй.</p> <p>Студент имеет 61 – 65 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ на один вопрос и частично ответил на второй. Студент имеет 66-70 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ только на один вопрос.</p>	<p>Студент имеет 61-70 баллов по итогам текущего и рубежного контроля, на экзамене (диф. зачете) дал полный ответ на один вопрос и частично (полностью) ответил на второй.</p>