

МИНОБРНАУКИ России
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ
заведующий кафедрой

Биотехнологии, химии и

стандартизации

(наименование кафедры)

М.Г. Сульман

(Ф.И.О. зав. кафедрой)

«__» _____ 20__ г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Промежуточной аттестации в форме экзамена

(промежуточной аттестации: экзамен, зачет, курсовая работа или курсовой проект; практики: с указанием вида и типа практики; государственного итогового экзамена)

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Наименование дисциплины (для промежуточной аттестации)

направление подготовки 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Типы задач – научно-исследовательский

Разработаны в соответствии с:

Рабочей программой дисциплины «Численные методы в химии»

утвержденной Проректором по УВР от «__» _____ 20__ г.

Разработчик(и): д.т.н., профессор, В.П. Молчанов

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Управление реакторами воздействием по расходу теплоносителя и его температуре.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Установить параметры регрессионной модели первой степени по методу выбранных точек и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня УМЕТЬ – 0 или 2 балла:

Как проводится расчет количества катализатора для адиабатического реактора? Оценка стоимости реакторной установки.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 2

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Управление реакторами воздействием по расходу и соотношению подачи реагентов.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Установить параметры регрессионной модели первой степени по методу парных сравнений и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Что такое промышленный эксперимент?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 3

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Сравнительная характеристика аппаратов с промежуточным и внутренним теплообменом. Аппараты с комбинированной схемой.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Установить параметры регрессионной модели первой степени по методу средних значений и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Как проводится исследование физических процессов: математическое моделирование?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 4

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:
Исследование макрокинетики. Последовательность анализа.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Установить параметры регрессионной модели второй степени по методу наименьших квадратов и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Как проводится исследование физических процессов: полунатурное моделирование?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 5

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:
Анализ методов решения обратной задачи химической кинетики.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Установить параметры регрессионной модели первой степени по методу наименьших квадратов и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Как проводится исследование физических процессов: аналоговое моделирование?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 6

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Понятие о планировании экспериментов. Реализация стратегии планирования эксперимента. Особенности организации активного и пассивного эксперимента.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен пятой степени по второму методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Как проводится исследование физических процессов: масштабное моделирование?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 7

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Автоматизация экспериментальных исследований. Классификация экспериментов в аспекте их автоматизации.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен четвертой степени по второму методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Что такое сложный исследовательский эксперимент?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 8

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Синтез системы автоматизированного проектирования. Структура системы и анализ ресурсов проектирования.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен третьей степени по второму методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Опишите критерии сложности экспериментальных исследований. Лабораторный эксперимент.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 9

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:
Дифференциальный метод анализа кинетических данных.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Построить интерполяционный многочлен второй степени по второму методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Что такое экспериментальный одно- и многофакторный отклик? Математическая формализация функции отклика. Построение уравнения регрессии двухфакторного отклика в виде параболоида.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 10

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Понятие о квантово-химических методах расчета.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен первой степени по второму методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Что такое параметрическая идентификация? Метод наименьших квадратов.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 11

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Моделирование. Аспекты применения моделирования. Математическое моделирование. Математическое моделирование в естествознании. Физические основы моделирования.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен пятой степени по первому методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Опишите особенности аппроксимации многочленами. Теорема Вейерштрасса.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 12

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Понятие об экспертных системах. Применение экспертных систем в химии.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен четвертой степени по первому методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Как проводится аппроксимация экспериментальных данных. Точность аппроксимации.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 13

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:
Способы компьютерного кодирования химических структур.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Построить интерполяционный многочлен третьей степени по первому методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:
Что такое регрессионный анализ? Уравнения регрессии.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 14

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Особенности исследования механизмов каталитических реакций. Автоматизация построения кинетических моделей.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен второй степени по первому методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Как проводится выбор и реализация метода решения уравнений математического описания. Машинное решение уравнений. Особенности решения дифференциальных уравнений.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 15

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Структура процесса принятия решений при определении механизма химической реакции. Выбор и использование компьютерных программ для конкретных объектов на разных этапах исследования.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен первой степени по первому методу Ньютона и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 2 балла:

Опишите аппарат идеального вытеснения. Математическое описание и метод решения.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 16

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Исследование механизмов реакций. Программы эмпирического направления.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен Лагранжа пятой степени и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Опишите аппарат идеального смешения. Математическое описание в установившемся и неустойчившемся режиме.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 17

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Исследование механизмов реакций. Программы формально-логического направления.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен Лагранжа четвертой степени и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Как проводится математическое моделирование формальной кинетики химических процессов?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 18

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Особенности процедуры выдвижения гипотез о механизмах реакций. Типы применяемого программного обеспечения, их характеристика и сравнительный анализ.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен Лагранжа третьей степени и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Что такое блочный принцип построения математических моделей?

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 19

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Компьютерное планирование органического синтеза и моделирование механизмов химических реакций: сходства и различия стратегических подходов.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен Лагранжа второй степени и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

**Как проводится моделирование технологических процессов?
Идентификация технических объектов.**

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 04.04.01 Химия

Профиль – Химия функциональных наноматериалов

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Дисциплина «Численные методы в химии»

Семестр 3

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 20

1. Задание для проверки уровня «ЗНАТЬ» – 0 или 1, или 2 балла:

Задачи автоматизации экспериментальных исследований. Типовая схема автоматизации.

2. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» – 0 или 2 балла:

Построить интерполяционный многочлен Лагранжа первой степени и определить значение $Y(X=7)$ для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

3. Задание для проверки уровня «УМЕТЬ» - 0 или 2 балла:

Опишите способы синтеза математических моделей. Проблема моделирования сложных объектов.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман