

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.Э.2.1 Вычислительные методы в химии»

Уровень высшего образования

БАКАЛАВРИАТ

Направление подготовки

04.03.01 Химия

(код и наименование направления подготовки)

Нефтехимия

(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Год набора 2021

Рабочая программа дисциплины «Б1.Д.В.Э.2.1 Вычислительные методы в химии» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии _____
наименование кафедры

протокол № 5 от "14" 01 2021г.

Заведующий кафедрой
Кафедра химии _____
наименование кафедры  подпись Е.В. Сальникова
расшифровка подписи

Исполнители:
Профессор _____
должность  подпись О.Н. Каныгина
расшифровка подписи

Ст. преподаватель _____
должность  подпись П.А. Пономарева
расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методической комиссии по направлению подготовки
04.03.01 Химия _____
код наименование  личная подпись Е.В. Сальникова
расшифровка подписи

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки
_____  личная подпись Н.Н. Бигалнова  расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству химико-биологического факультета
_____  личная подпись Е.С. Алешина
расшифровка подписи

№ регистрации _____

© Каныгина О.Н.,
Пономарева П.А., 2021
© ОГУ, 2021

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии» является:

ознакомление студентов с основными вычислительными методами, применяемыми для статистической обработки результатов химического эксперимента, необходимыми для их достоверной интерпретации, планирования дальнейшего эксперимента и моделирования химических процессов.

Задачи:

1) *теоретический компонент:*

- овладение основами профессионального языка, используемого при обсуждении и интерпретации результатов химического анализа;

- ознакомление с наиболее распространенными методами решения систем уравнений, включающих эмпирические параметры; с основами математического моделирования исследуемых химических процессов;

- осмысление места дисциплины место в системе изучаемых наук, области использования основных вычислительных методов в химии;

2) *познавательный компонент:*

- изучение основных приемов работы с электронными таблицами в среде Excel; методов приближенных вычислений;

- изучение методов определения характеристик распределений для массивов измерений, полученных при химическом анализе;

3) *практический компонент:*

- умение решать практические задачи, вводя элементы математического моделирования при эффективном использовании компьютерных технологий.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам (модулям) по выбору вариативной части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.11 Информатика*

Постреквизиты дисциплины: *Отсутствуют*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ПК*-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК*-1-В-1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	<u>Знать:</u> - технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности <u>Уметь:</u> - планировать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР <u>Владеть:</u> - Способностью выбирать и

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
		использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц (216 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	4 семестр	всего
Общая трудоёмкость	216	216
Контактная работа:	101,25	101,25
Лекции (Л)	34	34
Практические занятия (ПЗ)	16	16
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Консультации	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: - самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий; - подготовка к лабораторным занятиям; - подготовка к практическим занятиям; - подготовка к рубежному и промежуточному контролю)	114,75	114,75
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)	экзамен	

Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Основы статистического анализа	50	8	4	10	28
2	Современные микроэкономические статистики	54	8	4	12	30
3	Компьютерные технологии в статистической обработке результатов химического анализа	58	10	4	16	28
4	Многопараметровый статистический анализ	54	8	4	12	30
	Итого:	216	34	16	50	116

4.2 Содержание разделов дисциплины

№ 1. Основы статистического анализа

Введение; основные понятия о приближениях в математических описаниях экспериментальных данных. Теория и виды типичных для химического анализа распределений – Гаусса, Пирсона.

№ 2. Современные микростатистики

Основы микростатистик Стьюдента, Фишера, условия и области их применимости. Коэффициенты и таблицы Стьюдента и Фишера.

№ 3. Компьютерные технологии в статистической обработке результатов химического анализа

Использование электронных таблиц (Excel) для графического представления результатов анализа; построение и анализ диаграмм, гистограмм; использование средств, ускоряющих процесс обработки результатов; начала математического моделирования

№ 4. Многопараметровый статистический анализ

Понятия о многофакторном дисперсионном анализе; регрессионном анализе. Корреляции, регрессионный анализ, метод наименьших квадратов (МНК). Области применения МНК.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1,2	1	Правила определения значимых цифр в числах, способы нахождения средних значений и их округления.	4
3,4		Оформление технических отчетов по проделанной работе.	4
5-8	2	Решение задач по определению стандартных отклонений, дисперсий, абсолютных и относительных погрешностей.	8
9-13	3	Построение графических изображений заданных функций в Excel, упорядочивание и суммирование данных, составление таблиц.	10
14-19	3	Работа с массивами данных, применение методов Гаусса, Крамера для повышения эффективности расчетов. Критерии G (промахи), Стьюдента и Фишера.	12
20-25	4	Определение видов и коэффициентов корреляции, проведение регрессионного анализа и нахождение МНК с помощью компьютерных технологий.	12
		Итого	50

4.4 Практические занятия (семинары)

№ занятия	№ раздела	Тема	Кол-во часов
1,2	1	Работа с терминами, определяющими основные понятия, составление глоссария.	4
3,4	2	Реальные химические задачи, решаемые с помощью получения измерений в рамках микростатистик.	4
5,6	3	Основные приемы работы с компьютером, правила выполнения графических построений.	4
7,8	4	Составление и оформление отчетов по проделанной работе. Составление отчетов по индивидуальным творческим заданиям.	4
	Итого		16

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Основы вычислительных методов в химии [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по образовательным программам высшего образования по специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / [О. Н. Каныгина и др.]; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2019. - ISBN 978-5-7410-2273-3. - 140 с.

2. Каныгина, О. Н. Вычислительные методы в химии [Электронный ресурс] : задачник для обучающихся по образовательным программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / О. Н. Каныгина, Е. В. Сальникова, П. А. Пономарева; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2019. - ISBN 978-5-7410-2274-0. - 99 с.

5.2 Дополнительная литература

1. Стряпков, А. В. Математическая обработка результатов химического эксперимента [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. В. Стряпков, В. А. Минаева, Т. А. Григоренко . - Оренбург : ОГУ, 2005. - 166 с. - Библиогр. : с. 160. - ISBN 5-7410-0550-0. Издание на др. носителе [Электронный ресурс]

2. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика [Текст] : учеб. пособие / В. Е. Гмурман .- 12-е изд., перераб. - М. : Высшее образование, 2007. - 479 с. : ил.. - (Основы наук). - Прил.: с. 461-473. - Предм. указ.: с. 474-479. - ISBN 978-5-9692-0150-7.

3. Специальные термины для самостоятельной работы по дисциплине "Вычислительные методы в химии" [Электронный ресурс] : словарь / сост.: О. Н. Каныгина, Е. В. Сальникова, С. С. Макишева; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2018. - 58 с.

4. Каныгина, О. Н. Вычислительные методы в химии [Электронный ресурс] : методические указания для обучающихся по образовательным программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / О. Н. Каныгина, Е. А. Осипова, П. А. Пономарева; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т", Каф. химии. - Оренбург : ОГУ. - 2019. - 42 с.

5.3 Периодические издания

1. Вопросы статистики : журнал.-М.:Агентство «Роспечать», 2020.
2. Журнал физической химии : журнал. – М.: Академиздатцентр «Наука», 2020.

5.4 Интернет-ресурсы

1. Электронная библиотека IQlib (образовательные издания, электронные учебники, справочные и учебные пособия) - <http://www.iqlib.ru/>.

2. Электронная библиотека Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (методическая и учебная литература, создаваемая в электронном виде авторами СПбГТУ по профилю образовательной и научной деятельности университета) - <http://www.unilib.neva.ru/rus/lib/resources/elib/>.

3. <http://www.msu.ru> Сайт Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

4. <http://www.edu.ru/> Федеральный портал «Российское образование».

5. <https://www.coursera.org/> - «Coursera».

6. <https://openedu.ru/> - «Открытое образование».

7. <https://universarium.org/> - «Универсариум».

8. <https://www.edx.org/> - «EdX».

9. <https://www.lektorium.tv/> - «Лекториум».

10. <https://openedu.ru/course/> - «Открытое образование», Каталог курсов, MOOK: «Системы автоматизированного проектирования аддитивных технологий».

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы современных информационных технологий

1. Операционная система Microsoft Windows (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).

2. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint, OneNote, Outlook, Publisher, Access). (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.

3. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования - АИССТ (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011610456, правообладатель – Оренбургский государственный университет), режим доступа - <http://aist.osu.ru>.

4. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система /Разработчик ООО НПП «Гарант- Сервис», 121992 Москва, Воробьевы горы, МГУ, 2020.- Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: [\\fileserv1\garant.exe](http://fileserv1\garant.exe).

5. Консультант Плюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс, 2020. – Режим доступа к системе в сети ОГУ для установки системы: [\\ fileserv1\! CONSULT\cons.exe](http://fileserv1\CONSULT\cons.exe).

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий лекционного типа, используется аудитория оснащенная комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лабораторных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются специализированные лаборатории, оснащенные оборудованием.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащено компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.