

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет имени В.А. Бондаренко»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.Б.16 Вычислительные методы в химии»

Уровень высшего образования

СПЕЦИАЛИТЕТ

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(код и наименование специальности)

Аналитическая химия
(наименование направленности (профиля)/специализации образовательной программы)

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

Очная

Год набора 2026

Рабочая программа дисциплины «Б1.Д.Б.16 Вычислительные методы в химии» рассмотрен
и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии

наименование кафедры

протокол № 6 от "09" 02 2026 г.

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

наименование кафедры



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 специальности

04 05 01 Фундаментальная и прикладная химия

код наименование

личная подпись



расшифровка подписи

Заведующий отделом формирования фонда и научной обработки документов



личная подпись

расшифровка подписи



Уполномоченный по качеству химико-биологического факультета

личная подпись

А.Н. Сизенцов

расшифровка подписи

№ регистрации 188084

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии»:

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

Задачи обучающихся: - овладение основами профессионального языка, используемого при обсуждении и интерпретации результатов химического анализа; - осмысление места дисциплины место в системе изучаемых наук, области использования основных вычислительных методов в химии; - 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.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к базовой части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.13 Информатика, Б1.Д.Б.14 Информационные технологии и программирование, Б1.Д.Б.15 Математика*

Постреквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.22 Аналитическая химия, Б1.Д.Б.30 Современные методы анализа нефти и нефтепродуктов*

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
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	ОПК-3-В-2 Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	<u>Знать:</u> -стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности <u>Уметь</u> -применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения <u>Владеть:</u> -способностью применять современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения
ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать	ОПК-4-В-2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	<u>Знать:</u> -базовые основы в области математики и физики при планировании работ химической направленности современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач		Уметь: -обрабатывать данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик Владеть: -навыками планирования работ химической направленности, обработки и интерпретации полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач
ОПК-5 Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	ОПК-5-В-1 Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности ОПК-5-В-2 Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности ОПК-5-В-3 Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Знать: -современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля; Уметь: -использовать стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач в профессиональной деятельности Владеть: -современными вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц (180 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	4 семестр	всего
Общая трудоёмкость	180	180
Контактная работа:	102,25	102,25
Лекции (Л)	52	52
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа:	77,75	77,75
<i>- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и</i>		

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	4 семестр	всего
материала учебников и учебных пособий; - изучение разделов курса в системе электронного обучения; - подготовка к лабораторным занятиям; - подготовка к рубежному контролю и т.п.)		
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	диф. зач.	

Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Основы статистического анализа	38	12		8	18
2	Современные микростатистики	40	12		8	20
3	Компьютерные технологии в статистической обработке результатов химического анализа	54	14		22	18
4	Многопараметровый статистический анализ	48	14		12	22
	Всего:	180	52		50	78

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
1-4	1	Правила определения значимых цифр в числах, способы нахождения средних значений и их округления. Оформление технических отчетов по проделанной работе	4
5-8	2	Решение задач по определению стандартных отклонений, дисперсий, абсолютных и относительных погрешностей	4
9-13	3	Построение графических изображений заданных функций в Excel, упорядочивание и суммирование данных, составление таблиц.	8
14-19		Работа с массивами данных, применение методов Гаусса, Крамера для повышения эффективности расчетов. Критерии G (промахи), Стьюдента и Фишера.	10
20-25	4	Определение видов и коэффициентов корреляции, проведение регрессионного анализа и нахождение МНК с помощью компьютерных технологий.	12
		Итого:	50

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 направлениям подготовки 04.03.01 Химия /О.Н. Каныгина и др./ М-во науки и высшего образования Рос.Федерации, Федер.гос.бюджет.образова. учреждение высш.образования «Оренбургский гос.ун-т». – Оренбург: ОГУ.- 2019. – ISBN 978-5-7410-2273-3. – 140 с. http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/94296_20190517.pdf

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 направлениям 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.образова. учреждение высш.образования «Оренбургский гос.ун-т». – Оренбург: ОГУ.- 2019. – ISBN 978-5-7410-2274-0.- 99 с. http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/94294_20190517.pdf

5.2 Дополнительная литература

1. 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.

2. 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- Загл. с тит. экрана. [Электронный ресурс] http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/63744_20180313.pdf

5.3 Периодические издания

1. Вопросы статистики : журнал -М.: Агенство «Роспечать».
2. Журнал Физической химии : журнал. – М.: Академиздатцентр «Наука».

5.4 Интернет ресурсы

http://mipt.ru/	Сайт Московского физико-технического института
http://www.msu.ru	Сайт Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова
http://www.edu.ru/	Федеральный портал «Российское образование»
http://www.orenport.ru/	Региональный портал образовательного сообщества Оренбуржья
http://fepo.i-exam.ru/	Федеральный экзамен в сфере профессионального образования
http://i-exam.ru/node/	Единый портал интернет тестирования в сфере образования
http://training.i-exam.ru/	Интернет - тренажеры в сфере образования
https://www.lektorium.tv/mooc	- «Лекториум»
https://www.coursera.org/	- «Coursera»;
https://openedu.ru/	- «Открытое образование»;
https://www.lektorium.tv/	- «Лекториум»; МООК:
https://openedu.ru/course/	- «Открытое образование», Каталог курсов, МООК: «Системы автоматизированного проектирования аддитивных технологий»;

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Операционная система РЕД ОС.
2. Пакет офисных приложений «МойОфис Образование»
3. Для работы с ресурсами Интернет - веб-браузер Яндекс <https://yandex.ru/>..
4. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. / Разработчик ООО НПП «ГАРАНТ-Сервис», 119992, Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1990–2026]. – Режим доступа в сети ОГУ <http://garant.net.osu.ru>
5. 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>.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, семинарского типа, для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лабораторных занятий используется лаборатория (№ 3322), оснащенная аналитическим оборудованием, компьютерный класс (№ 3332), включающий 9 компьютеров для обработки экспериментальных результатов.