

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б.1.Б.19 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)

Тип образовательной программы

Программа академического бакалавриата

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Год набора 2016

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии

наименование кафедры

протокол № 5 от "13" 01 2016г.

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

наименование кафедры



подпись

Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Исполнители:

Профессор

должность



подпись

О.Н. Каныгина

расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методической комиссии по направлению подготовки

04.03.01 Химия

код наименование



личная подпись



расшифровка подписи

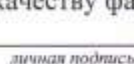
Заведующий отделом комплектования научной библиотеки


личная подпись

Н.Н. Грицай

расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета


личная подпись

Е.С. Барышева

расшифровка подписи

№ регистрации 48628

© Каныгина О.Н., 2016

© ОГУ, 2016

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 обучения включают:

- 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;
 - ознакомление с основами математического моделирования исследуемых химических процессов;
 - осмысление места дисциплины место в области 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 базовой части блока 1 «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б.1.Б.10 Математика*

Постреквизиты дисциплины: *Б.1.Б.13 Аналитическая химия, Б.1.Б.14 Органическая химия, Б.1.Б.15 Физическая химия, Б.1.Б.17 Высокмолекулярные соединения, Б.1.Б.18 Химическая технология топлива и углеродных материалов, Б.1.В.ОД.8 Химическая технология, Б.1.В.ДВ.3.2 Процессы и аппараты химических технологий, Б.2.В.П.2 Научно-исследовательская работа*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
<p>Знать: –методы получения, идентификации и исследования свойств веществ (материалов) – стандартные методы обработки результатов эксперимента</p> <p>Уметь: – проводить многостадийный синтез – выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения – обрабатывать результаты эксперимента</p> <p>Владеть: – навыками проведения эксперимента и методами обработки результатов</p>	<p>ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций</p>
<p>Знать: методы решения типовых задач базовых разделов математики (математического анализа, аналитической геометрии, линейной алгебры, дифференциальных уравнений); основы фундаментальных разделов физики (механики, молекулярной физики и термодинамики, электродинамики и оптики);</p> <p>Уметь: решать учебные задачи из соответствующих разделов математики и</p>	<p>ОПК-4 способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных</p>

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
физики. Владеть: основными понятиями математического анализа, аналитической геометрии, линейной алгебры, механики, электродинамики, оптики, квантовой механики; начальными представлениями о физических и математических моделях.	технологий с учетом основных требований информационной безопасности

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

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

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	1 семестр	всего
Общая трудоёмкость	216	216
Контактная работа:	85,25	85,25
Лекции (Л)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Консультации	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: <i>самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий);</i> - подготовка к лабораторным занятиям; - подготовка к практическим занятиям; - подготовка к рубежному контролю и т.п.)	130,75	130,75
Вид итогового контроля	экзамен	

Разделы дисциплины, изучаемые в 1 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Основы статистического анализа.	50	8		10	32
2	Современные микростатистики	50	8		12	30
3	Компьютерные технологии в статистической обработке результатов химического анализа	56	10		16	30
4	Многопараметровый статистический анализ	60	8		12	40
	Итого:	216	34		50	132

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.	1	Правила определения значимых цифр в числах, способы нахождения средних значений и их округления. Оформление технических отчетов по проделанной работе	4 4
2,3	2	Решение задач по определению стандартных отклонений, дисперсий, абсолютных и относительных погрешностей.	8
4	3	Построение графических изображений заданных функций в Excel, упорядочивание и суммирование данных, составление таблиц.	10
5,6	3	Работа с массивами данных, применение методов Гаусса, Крамера для повышения эффективности расчетов. Критерии G (промахи), Стьюдента и Фишера.	12
7,8	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. Сальникова Е.В. Методы концентрирования и разделения микроэлементов: учебное пособие/ Е.В. Сальникова, Е.А. Кудрявцева. - Москва, ООО Тиру, 2012,-220 с.

ISBN 978-5-93883-215-2/

2. 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]

5.2 Дополнительная литература

3. 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.

5.3 Периодические издания

1. Вычислительные технологии : журнал. – М.: Агентство «Роспечать», 2016
2. Информационные технологии : журнал. – М.: Агентство «Роспечать», 2016
3. Журнал аналитической химии : журнал. – М.: Академиздатцентр «Наука», 2016
4. Химия и жизнь – XXI век : журнал. – М.: Агентство "Роспечать".2016

5.4 Интернет-ресурсы

1. Royal Society of Chemistry [Электронный ресурс] : полнотекстовая база данных / Королевское химическое общество Великобритании. – Режим доступа : <http://pubs.rsc.org/>, в локальной сети ОГУ.

2. SCOPUS [Электронный ресурс] : реферативная база данных / компания Elsevier. – Режим доступа: <https://www.scopus.com/>, в локальной сети ОГУ.

3. Web of Science [Электронный ресурс]: реферативная база данных / компания Clarivate Analytics. – Режим доступа : <http://apps.webofknowledge.com/>, в локальной сети ОГУ.

4. ANCHEM.RU [Электронный ресурс] : Учебники, справочники, методики, журналы по аналитической химии. – Режим доступа : www.anchem.ru/

5. American Chemical Society [Электронный ресурс] : база данных. – Режим доступа : <https://www.acs.org/content/acs/en.html>, в локальной сети ОГУ.

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>.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

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

Для проведения лабораторных занятий используется компьютерный класс (ауд.№ 3332), включающий 9 компьютеров для обработки экспериментальных результатов.

К рабочей программе прилагаются:

- Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине;
- Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

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]