

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 2017

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии

*наименование кафедры*

протокол № 6 от "6" 02 2017.

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

*наименование кафедры*



*подпись*

Е.В. Сальникова

*расшифровка подписи*

Исполнители:

Профессор

*должность*



*подпись*

О.Н. Каныгина

*расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:

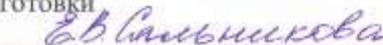
Председатель методической комиссии по направлению подготовки

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 50799

© Каныгина О.Н., 2017

© ОГУ, 2017

## 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 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 Высокомолекулярные 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><b>Знать:</b> – методы получения, идентификации и исследования свойств веществ (материалов) – стандартные методы обработки результатов эксперимента</p> <p><b>Уметь:</b> – проводить многостадийный синтез – выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения – обрабатывать результаты эксперимента</p> <p><b>Владеть:</b> – навыками проведения эксперимента и методами обработки результатов</p>	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
<p><b>Знать:</b> методы решения типовых задач базовых разделов математики (математического анализа, аналитической геометрии, линейной алгебры,</p>	ОПК-4 способностью решать стандартные задачи профессиональной

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
дифференциальных уравнений); основы фундаментальных разделов физики (механики, молекулярной физики и термодинамики, электродинамики и оптики); <b>Уметь:</b> решать учебные задачи из соответствующих разделов математики и физики. <b>Владеть:</b> основными понятиями математического анализа, аналитической геометрии, линейной алгебры, механики, электродинамики, оптики, квантовой механики; начальными представлениями о физических и математических моделях.	деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных 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
<b>Общая трудоёмкость</b>	<b>216</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа:</b>	<b>85,25</b>	<b>85,25</b>
Лекции (Л)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Консультации	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
<b>Самостоятельная работа:</b>	<b>130,75</b>	<b>130,75</b>
<i>выполнение расчетно-графического задания (РГЗ);</i>	30	30
<i>- самостоятельное изучение разделов (Использование электронных таблиц (Excel) для графического представления результатов анализа);</i>	20	20
<i>- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;</i>	30	30
<i>- подготовка к лабораторным занятиям;</i>	20	20
<i>- подготовка к коллоквиумам;</i>		
<i>- подготовка к рубежному контролю и т.п.)</i>	10,75	10,75
<b>Вид итогового контроля</b>	<b>экзамен</b>	

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. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман.- 11-е изд., перераб. - М. : Юрайт, 2010. - 405 с. - (Основы наук). - Прил.: с. 388-404 - ISBN 978-5-9916-0700-1. - ISBN 978-5-9692-0930-5.

### 5.3 Периодические издания

1. Вычислительные технологии : журнал. – М.: Агентство «Роспечать», 2016
2. Информационные технологии : журнал. – М.: Агентство «Роспечать», 2016, 2017
3. Журнал физической химии : журнал. – М.: Академиздатцентр «Наука», 2017

### 5.4 Интернет-ресурсы

<a href="http://mipt.ru/">http://mipt.ru/</a>	Сайт Московского физико-технического института
<a href="http://www.msu.ru">http://www.msu.ru</a>	Сайт Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова
<a href="http://www.edu.ru/">http://www.edu.ru/</a>	Федеральный портал «Российское образование»
<a href="http://www.orenport.ru/">http://www.orenport.ru/</a>	Региональный портал образовательного сообщества Оренбуржья
<a href="http://fepo.i-exam.ru/">http://fepo.i-exam.ru/</a>	Федеральный экзамен в сфере профессионального образования
<a href="http://i-exam.ru/node/">http://i-exam.ru/node/</a>	Единый портал интернет тестирования в сфере образования
<a href="http://training.i-exam.ru/">http://training.i-exam.ru/</a>	Интернет - тренажеры в сфере образования
<a href="https://www.lektorium.tv/mooc">https://www.lektorium.tv/mooc</a>	- «Лекториум»
<a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>	- ЭБС Университетская библиотека онлайн
<a href="http://www.physbook.ru/">http://www.physbook.ru/</a>	- электронные учебники и журналы по химии

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

1. Операционная система Windows (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).
2. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint) (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.
3. Springer [Электронный ресурс] : база данных научных книг, журналов, справочных материалов / компания Springer Customer Service Center GmbH . – Режим доступа : <https://link.springer.com/>, в локальной сети ОГУ.

## 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.

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