

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 2022

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 "17" января 2022 г.

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

наименование кафедры



подпись

Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Исполнители:

Профессор

должность



подпись

О.Н. Каныгина

расшифровка подписи

старший преподаватель

должность



подпись

П.А. Пономарева

расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методической комиссии по направлению подготовки

04.03.01 Химия

код направления



личная подпись

Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки

личная подпись



Н.Н. Бигалиева

расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета

химико-биологического

личная подпись



А.Н. Сизенцов

расшифровка подписи

№ регистрации _____

© Каныгина О.Н., 2022
Пономарева П.А., 2022
© ОГУ, 2022

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

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.11 Информатика, Б1.Д.Б.12 Информационные технологии и программирование*

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> -теоретические 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, поставленные 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 контролю и т.п.)	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		10	32
2	Современные микростатистики	50	8		12	30
3	Компьютерные технологии в статистической обработке результатов химического анализа	56	10		16	30
4	Многочисленные 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.	4
		Оформление технических отчетов по проделанной работе	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

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 в рамках микростатистики	4
5,6	3	Правила выполнения графических построений на компьютере	4
7,8	4	Подготовка отчетов по проделанным работам	4
	Итого:		16

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1. Основная литература

1. Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии : учебное пособие / А. Н. Смагунова, Г. В. Пашкова, Л. И. Белых.- Лань, 2022. - 120 с.

2. 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. / Оренбург: ОГУ.- 2019. – ISBN 978-5-7410-2273-3. – 140 с.

3. 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. Оренбург: ОГУ. - 2019. – ISBN 978-5-7410-2274-0.- 99 с.

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.

4. 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 источник](#)

5.3 Периодические издания

1. Вопросы статистики :журнал -М.: Агенство «Роспечать».
2. Журнал Физической химии : журнал. –М.: Академиздатцентр «Наука».
3. Химическая промышленность сегодня
<https://dlib.eastview.com/browse/publication/123706/udb/12>

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»
http://biblioclub.ru/	- ЭБС Университетская библиотека онлайн
http://www.physbook.ru/	- электронные учебники и журналы по химии
https://www.coursera.org/	- «Coursera»;
https://openedu.ru/	- «Открытое образование»;
https://www.lektorium.tv/	- «Лекториум»; MOOK:
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

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

4. ГАРАНТ Платформа F1[Электронный ресурс] : справочно-правовая система/Разработчик ООО НПП «Гарант – Сервис», 1219992 Москва, Воробьевы горы, МГУ, 2022. Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: <\\fileserv1> \ garant.exe.

5. Консультант Плюс [Электронный ресурс] : электронное периодическое издание справочная правовая система /Разработчик ЗАО «Консультант Плюс», 2022. – Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: <\\fileserv1> \!CONSULT\ cons.exe.

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, оснащенная аналитическим оборудованием и компьютерный класс, включающий 9 компьютеров для обработки экспериментальных результатов.