Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

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 2022

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.Б.16 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 _____ Е.В. Сальникова
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

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

Старший преподаватель _____ П.А. Пономарева
должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по специальности
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия _____ Е.В. Сальникова
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

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

Уполномоченный по качеству факультета
химико-биологического _____ А.Н. Сизенцов
личная подпись *расшифровка подписи*

№ регистрации _____

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

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	**Знать:** -стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности **Уметь** -применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения **Владеть:** -способностью применять 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
ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4-В-2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	**Знать:** -базовые основы в области математики и физики при планировании работ химической направленности современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения **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 IT-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 IT-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: *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.)*	**77,75**	**77,75**
Вид итогового контроля (зачет, 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 микростастистики	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 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		Работа с массивами данных, применение методов Гаусса, Крамера для повышения эффективности расчетов. Критерии G (промахи),	12

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
		Стьюдента и Фишера.	
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.

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 м 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.

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 ресурс]

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

6. Вершинин, В. И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента: учебное пособие / В. И. Вершинин, Н. В. Перцев. - Лань, 2022. - 36 с.

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»
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»; 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 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: \\fileserver 1 \ 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: \\fileserver 1 \!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 (№ 3322), оснащенная аналитическим оборудованием, компьютерный класс (№ 3332), включающий 9 компьютеров для обработки экспериментальных результатов.