



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра органической и физической химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Л.Б. Кочетова Л.Б. Кочетова
(подпись)

« 19 » июня 20 19 г.

Рабочая программа дисциплины

Расчеты в химии

Уровень высшего образования:	бакалавриат
Квалификация выпускника:	Бакалавр
Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Медицинская и фармацевтическая химия

Иваново



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Расчеты в химии» является изучение теоретических основ постановки химического эксперимента и обработки экспериментальных данных, имеющих прикладное значение для подготовки бакалавров к научно-исследовательской работе, связанной с использованием химических явлений и процессов при разработке и исследовании лекарственных средств и биологически активных веществ, педагогической деятельности, основанной на практических навыках планирования и анализа результатов эксперимента.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Расчеты в химии» относится к обязательной части образовательной программы и читается обучающимся после изучения ими дисциплин «Математика» (1, 2 семестры) и «Информатика и информационные технологии в химии» (2 семестр), базируясь на полученных при их изучении представлениях о фундаментальных разделах математики, таких как интегрирование, дифференцирование, математический анализ, основы линейной и матричной алгебры, необходимые для решения расчетных задач по химии; в области информатики, необходимых для изучения расчетных программ, а также использования ресурсов Интернета.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать: фундаментальные основы математики (интегрирование, дифференцирование, математический анализ, основы линейной и матричной алгебры); фундаментальные основы информатики (принципы работы компьютера, виды программного обеспечения, основы программирования),

Уметь: пользоваться операционной системой «WINDOWS» и ее приложениями; проводить формализацию прикладных задач на основе компетенций, формируемых по неорганической и аналитической химии;

Иметь: навыки работы с современными компьютерными и информационно-коммуникационными технологиями общего и химического назначения.

Освоение данной дисциплины как предшествующей и вспомогательной необходимо при изучении следующих дисциплин: «Физическая химия» (4, 5 и 6 семестры), «Химическая технология» (6 семестр), а также для прохождения учебной практики ознакомительной (6 семестр), производственной практики, педагогической (8 семестр), производственной практики, научно-исследовательской работы (8 семестр), производственной практики, преддипломной (8 семестр).

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

б) общепрофессиональные (ОПК):

ОПК-3: способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: основные методы математического анализа и моделирования; статистические методы анализа экспериментальных данных; методы оценки истинного значения результата и вероятного разброса; методы сопоставления статистических величин; основы корреляционного, дисперсионного и регрессионного анализа; теоретические основы планирования эксперимента



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

современные вычислительные средства и информационные технологии для решения профессиональных задач; алгоритмы для решения химических задач с применением программного средств MathCad и Excel; методы и способы проверки статистических гипотез и принятия решений по результатам такой проверки; статистические методы анализа экспериментальных данных; главные типы планов эксперимента и методы их реализации (**ОПК-3**).

Уметь: применять современные вычислительные средства и информационные технологии для решения профессиональных задач, применять основные законы химии при обсуждении полученных математических расчетов и компьютерного моделирования; интерпретировать математические модели изучаемых процессов; проводить статистический анализ тестовых испытаний, правильно и обоснованно интерпретировать их результаты; выбирать план эксперимента в соответствии с особенностями изучаемых процессов и требуемыми свойствами математических моделей (**ОПК-3**).

Иметь: навыки использования современных вычислительных средств и информационных технологий для решения профессиональных задач, практический опыт применения математического аппарата статистического анализа результатов эксперимента; навыки технологии анализа результатов тестовых испытаний и способами их интерпретации; навыки применения методов отбора планов эксперимента, построения математических моделей и их интерпретации (**ОПК-3**).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 академических часа).

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения)
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	Формы промежуточной аттестации
Раздел 1. Численные методы и программирование.					
1.	Программирование	3	2		
	Лабораторная работа № 1			2 лабор. занятие	Отчет № 1
	Лабораторная работа № 2			2 лабор. занятие	Отчет № 2
2.	Решение уравнений	3	4		
	Лабораторная работа № 3			2 лабор. занятие	Отчет № 3
	Лабораторная работа № 4			2 лабор. занятие	Отчет № 4
	Лабораторная работа № 5			2 лабор.	Отчет № 5



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

				занятие	
3.	Анализ данных и оптимизация	3	2		
	Лабораторная работа № 6			2 лабор. занятие	Отчет № 6
	Лабораторная работа № 7			2 лабор. занятие	Отчет № 7
4.	Интегрирование и решение дифференциальных уравнений	3	2		
	Лабораторная работа № 8			2 лабор. занятие	Отчет № 8
	Лабораторная работа № 9			2 лабор. занятие	Отчет № 9
	Коллоквиум			2 лабор. занятие	Тестирование
Раздел 2. Статистические методы анализа и планирование эксперимента.					
1.	Введение в статистические методы анализа и планирования эксперимента.	3	2		
	Лабораторная работа № 10			2 лабор. занятие	Отчет № 10
2.	Статистические оценки. Специальные распределения и их использование	3	2		
	Лабораторная работа № 11			2 лабор. занятие	Отчет № 11
	Лабораторная работа № 12			2 лабор. занятие	Отчет № 12
3.	Корреляционный анализ. Регрессионный анализ Дисперсионный анализ	3	2		
	Лабораторная работа № 13			2 лабор. занятие	Отчет № 13
4.	Планирование эксперимента. Полный факторный эксперимент	3	2		
	Лабораторная работа № 14			2 лабор. занятие	Отчет № 14
	Коллоквиум			2 лабор. занятие	Тестирование
Итого по дисциплине:			18	32	Зачет



4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Раздел 1. Численные методы и программирование.

1. Программирование.

Программа, структура программы, основные операторы алгоритмических языков программирования. Алгоритм: способы отображения, требования к нему. Данные: представление данных, способы их ввода, вывода, хранения и переработки. Основные структуры алгоритмов: следование (расчеты по формулам). Специфика расчетных химических задач, использование системы MathCad. Основные структуры алгоритмов: подпрограммы, процедуры и функции, разветвление и обход, множественный выбор, циклы. Их реализация для решения математических задач и использование для решения конкретных химических задач. Программирование в MathCad.

2. Решение уравнений.

Решение нелинейного уравнения. Задача отыскания корней и ее решение. Вычисления корней с заданной точностью: метод половинного деления, метод хорд и метод Ньютона с помощью итерационных вычислений, критерии выхода из него. Поиск корней уравнений и систем нелинейных уравнений с помощью MathCad. Примеры решения нелинейных уравнений в химических задачах. Решение систем линейных уравнений. Общие положения. Метод Крамера. Методы Гаусса и Гаусса-Жордана. Метод обращения матрицы. Итерационный метод Гаусса-Зейделя. Реализация расчетных методов с помощью системы MathCad. Примеры решения прикладных химических задач.

3. Анализ данных и оптимизация.

Основные понятия оптимизации – целевая функция, параметры оптимизации понятие одномерной и многомерной оптимизации, задачах линейного и нелинейного программирования. Одномерная оптимизация. Отделение экстремумов. Уточнение положения экстремума с помощью методов дихотомии, золотого сечения, квадратичной интерполяции-экстраполяции. Поиск экстремумов функции одной и нескольких переменных с помощью MathCad. Примеры использования оптимизации для решения практических задач. Аппроксимация данных функцией. Регрессия. Линейная регрессия с расчетом статистических характеристик. Аппроксимация полиномом. Регрессии в MathCad. Сглаживание и фильтрация экспериментальных данных. Интерполяция. Экстраполяция. Примеры обработки данных химического эксперимента.

4. Интегрирование и решение дифференциальных уравнений.

Вычисление определенных интегралов с помощью квадратурных формул (трапеций, Симпсона), методом Монте-Карло. Интегрирование таблично заданной функции. Методы, используемые в MathCad для вычисления определенных интегралов. Расчет изменений термодинамических функций химической реакции по интегральным уравнениям. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка. Решение ОДУ и систем ОДУ с помощью MathCad. Расчет изменений термодинамических функций химической реакции по дифференциальным уравнениям. Моделирование кинетики сложных химических реакций.

Раздел 2. Статистические методы анализа и планирование эксперимента.

1. Введение в статистические методы анализа и планирования эксперимента.

Случайные и закономерные величины. Случайные факторы. Представление о разбросе в повторяющемся эксперименте. Истинное значение результата эксперимента, разброс относительно центра распределения. Принципы планирования эксперимента в условиях наличия помех. Использование математической статистики. Гауссово распределение и его применимость при обработке результатов химического эксперимента. Результат эксперимента. Понятие о выборке и континууме. Их характеристики. Объем выборки химического эксперимента. Оценка истинного значения результата, выборочное среднее. Среднее арифметическое как оценка генерального среднего. Выборочная дисперсия и дисперсия континуума. Число степеней



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

свободы. Среднее стандартное отклонение. Коэффициент вариации, нормированное отклонение. Точность и воспроизводимость химического эксперимента.

2. Статистические оценки. Специальные распределения и их использование.

Статистические оценки генеральных параметров. Выборочное среднее и его дисперсия. Показатель точности. Безразмерные показатели точности и их использование. Применение специальных распределений при статистической обработке результатов химического эксперимента. Распределение Стьюдента, его свойства. Таблицы критерия Стьюдента. Оценка разброса в выборочном среднем. Доверительный интервал, степень риска. Оценки сверху и снизу. Распределение Пирсона. Таблицы критерия Пирсона. Оценка дисперсии и стандартного отклонения. Распределение Фишера-Снедекора. Сравнение параметров двух выборок. Сравнение дисперсий. Сравнение генеральных средних. Определение выбросов.

3. Корреляционный анализ. Регрессионный анализ. Дисперсионный анализ.

Корреляционные и функциональные зависимости. Корреляция как соответствие между зависимыми величинами, как следствие закономерной и случайной природы химического эксперимента. Истинный и эмпирический коэффициенты корреляции. Положительная и отрицательная корреляции. Проверка коэффициента корреляции на статистическую значимость. Качество корреляций в химии. Определение ошибок, поправка Шеппарда. Определение требуемого числа экспериментов. Сопоставление коэффициентов корреляции. Множественная линейная корреляция, частные и общие коэффициенты корреляции.

Понятие о регрессии. Линейная регрессия. Линеаризация зависимостей в химическом эксперименте и возможные ошибки. Метод наименьших квадратов. Использование стандартных статистических программ ПЭВМ.

Дисперсионный анализ. Оценка вклада в общую дисперсию погрешностей метода и воздействия условий эксперимента (факторов). Оценка статистической значимости факторов.

4. Планирование эксперимента. Полный факторный эксперимент.

Системный подход к химическому эксперименту. Математическое моделирование при химических исследованиях. Классификация моделей. Методы моделирования. Планирование эксперимента в химии: этапы, идеи и методы. Ограничения при постановке химического эксперимента. Выбор моделей. Познавательная ценность и предсказательная способность моделей. Полный факторный эксперимент типа 2^k . Матрица плана эксперимента. Ограниченность метода. Определение коэффициентов в линейной модели, оценка дисперсии воспроизводимости и дисперсии адекватности. Проверка коэффициентов модели на значимость.

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Расчеты в химии» используются следующие образовательные технологии:

- проектная технология,
- рейтинговая технология;
- технология развития критического мышления;
- технология учебной дискуссии;
- групповая работа.

Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- технологии смешанного обучения (чтение лекций с использованием мультимедийных презентаций; использование ЭИОС «Мой университет» при подготовке к коллоквиумам).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Самостоятельная работа студентов заключается в оформлении отчетов, написании опорных конспектов по заданной теме и подготовке к коллоквиумам. Обеспечивается Практикумом по дисциплине "Расчеты в химии" для студентов направления подготовки 04.03.01 "Химия" и специальности 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" / сост. А.И. Садовников, Н.А. Магдалинова. – Иваново: ИвГУ, 2019. – 121 с. (URL: http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/metod/magdalnova_2019_1.htm/view) и учебным пособием: Крылов, Е.Н. Статистические методы анализа и планирования эксперимента. Учебное пособие. / Е.Н. Крылов. – Иваново: ИвГУ, 2012. – 66 с. (находится на кафедре в электронном виде), кроме этого методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в Приложении 1 к рабочей программе дисциплины в ЭИОС «Мой университет» (содержит график лабораторных занятий, вопросы к коллоквиумам и зачету, примерные варианты тестовых заданий).

При самостоятельной работе студентам предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая самостоятельная работа, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе студентов с лекционным материалом;
- подготовке к коллоквиумам, к текущему и итоговому контролю;
- использовании материалов из тематических информационных ресурсов и учебной литературы при подготовке к лабораторным и практическим занятиям;
- написании опорного конспекта;
- подготовке к зачету.

Весь методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в Приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

В рамках рейтинговой системы оценки знаний обучающихся биолого-химического факультета, обучающийся может набрать по данной дисциплине максимально 100 рейтинговых баллов. В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: лабораторные работы, коллоквиумы. Для проведения итогового контроля – зачет (вопросы для подготовки к зачету). За выполнение и оформленные отчеты лабораторных работ могут получить 40 баллов – (работы № 1–№ 6, № 8–№ 9, № 11–№ 12 – 3 балла, работа № 7 – 4 балла, работы № 10, № 13 и № 14 – 2 балла), 20 баллов – за сдачу коллоквиумов (тестирование или ответы на вопросы, 2 коллоквиума по 10 баллов за каждый). Зачет проводится в устной форме. Ответ на зачете оценивается из расчета в 40 баллов.

Для получения оценки «зачтено» обучающиеся должны набрать не менее 55 баллов (выполнить все лабораторные работы и оформить отчеты по ним, набрав суммарно не менее 25 баллов, сдать все коллоквиумы не менее чем на 6 баллов и сдать зачет не менее 18 баллов). Обучающиеся не набравшие 55 баллов, или выполнившие и оформившие отчеты менее 14 лабораторных работ и сдавшие коллоквиумы менее 6 баллов и зачет менее 18 баллов, или не сдавшие коллоквиумы и зачет получают оценку «не зачтено».

Типовые варианты вопросов и тестовых заданий находятся в Приложении 2 к РП «Фонд оценочных средств».

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

1. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента. Ч. II. Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента: учебное пособие / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2011. – 67с.

Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735>

2. Порсев, Е.Г. Организация и планирование экспериментов: учебное пособие / Е.Г. Порсев. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. – 155 с.

Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228880>

3. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие. 3-е изд., перераб. и доп. / А.Ю. Закгейм – М.: Логос, 2012. – 304 с.

Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988>

4. Практикум по дисциплине "Расчеты в химии" для студентов направления подготовки 04.03.01 "Химия" и специальности 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" / сост. А.И. Садовников, Н.А. Магдалинова. – Иваново: ИвГУ, 2019. – 121 с.

Режим доступа: http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/metod/magdalnova_2019_1.htm/view

5. Крылов Е.Н. Статистические методы анализа и планирования эксперимента. Учебное пособие. – Иваново: Изд. РИО ИвГУ, 2012. 66 с.

Режим доступа: http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/ucheb/krilov_2012.htm

Дополнительная литература:

1. Крылов Е.Н. Планирование эксперимента. Метод. указания к практикуму. – Иваново: ИвГУ. 2011. – 56 с. http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/metod/krilov_2011_1.htm

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»

<https://uni.ivanovo.ac.ru;>

[http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/3388.html;](http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/3388.html)

[http://www.iki.rssi.ru/magbase/REFMAN/STATTEXT/modules/stexdes.html;](http://www.iki.rssi.ru/magbase/REFMAN/STATTEXT/modules/stexdes.html)

[http://www.statsoft.ru/home/portal/textbook_ind/modules/examples/plan.htm;](http://www.statsoft.ru/home/portal/textbook_ind/modules/examples/plan.htm)

[http://www.bru.mogilev.by/students/material/researches/glava16.htm;](http://www.bru.mogilev.by/students/material/researches/glava16.htm)

[http://www.biometrika.tomsk.ru/annot2.htm;](http://www.biometrika.tomsk.ru/annot2.htm)

[http://biblio.cimpo.univer.omsk.su/index.php;](http://biblio.cimpo.univer.omsk.su/index.php)

[http://www.langrus.ru/content/view/3/26/;](http://www.langrus.ru/content/view/3/26/)

[http://www.ast-centre.ru/books/dictionary/243/;](http://www.ast-centre.ru/books/dictionary/243/)

[http://www.nsu.ru/archive/conf/nit/96/sect1/node23.html.](http://www.nsu.ru/archive/conf/nit/96/sect1/node23.html)

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru;

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>;

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>.

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office, Mathcad Express, интернет-браузер Internet Explorer, Мой университет.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, выполнения проектов с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: демонстрационное оборудование (модели, макеты); электронные пособия (презентации), печатные пособия (таблицы, плакаты).



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Автор рабочей программы дисциплины: доц., к.х.н. Магдалинова Н.А.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры органической и физической химии

« 5 » июня 20 19 г., протокол № 14

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ Л.Б. Кочетова
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ (И.О.Фамилия)
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ (И.О.Фамилия)
(подпись)