

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Курганский государственный университет»
(КГУ)

Кафедра физической и прикладной химии



УТВЕРЖДАЮ:

Ректор

/ Н.В.Дубив/

« 31 » августа 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительные методы в химии
образовательной программы высшего образования —
программы специалитета

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность:

Аналитическая химия

Форма обучения: очная

Курган 2020

Рабочая программа дисциплины Вычислительные методы в химии составлена в соответствии с учебным планом по программе специалитета Фундаментальная и прикладная химия (Аналитическая химия) утвержденным для очной формы обучения «28» августа 2020 года;
(дата утверждения учебного плана)

Рабочая программа дисциплины одобрена на заседании кафедры Физическая и прикладная химия « 28 » сентября 2020 года,
Протокол № 1

Рабочую программу составил
старший преподаватель кафедры
«Физическая и прикладная химия»



А.В.Костин

Согласовано:

Заведующий кафедрой
«Физическая и прикладная химия»



Л.В. Мосталыгина

Специалист по учебно-методической работе
Учебно-методического отдела



Г.В. Казанкова

Начальник Управления
образовательной деятельности



С.Н. Синецын

1. Объем дисциплины:

Всего: 5 экзаменационных единицы трудоемкости (180 академических часов)

Вид учебной работы	На всю дисциплину	Семестр
		3
Аудиторные занятия (всего часов), в том числе:	80	80
Лекции	16	16
Лабораторные работы	64	64
Практические занятия	-	-
Самостоятельная работа (всего часов), в том числе:	100	100
Курсовая работа	-	-
Курсовой проект	-	-
Расчетно-графические работы	-	-
Научно-исследовательская работа	-	-
Подготовка к экзамену	27	27
Другие виды самостоятельной работы	73	73
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен): Экзамен	Экзамен	Экзамен
Общая трудоемкость дисциплины и трудоемкость по семестрам в часах:	180	180

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

1 Дисциплина «Вычислительные методы в химии» относится к вариативной части блока Б1 - Обязательные дисциплины.

2 Краткое содержание дисциплины: Общие вопросы вычислительных методов. Основы метрологических расчетов. Дисперсионный анализ. Корреляционный и регрессионный анализ. Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных. Решение линейных систем. Итерационные способы решения систем. Основы математического моделирования химических систем. Прогнозирование свойств и параметров химических систем

3 Освоение обучающимися дисциплины «Вычислительные методы в химии» опирается на знания, умения, навыки и компетенции, приобретенные в результате освоения предшествующих дисциплин:

- Математика;
- Физика;
- Информатика;
- Неорганическая химия;
- Аналитическая химия.

4 Знания, умения и навыки, полученные при освоении дисциплины «Вычислительные методы в химии», являются необходимыми для освоения дисциплин:

- Строение вещества;
- Физическая химия;
- Химическая технология;
- Физические методы исследования;
- Анализ реальных объектов;
- Спектроскопические методы анализа;
- Электрохимические методы анализа;
- Комплексные соединения и органические реагенты в аналитической химии;
- Химико-аналитический контроль качества окружающей среды.

3. Планируемые результаты обучения

Целью освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии» является подготовка студентов со специализированными знаниями в области современных вычислительных методов, представление химии как количественной науки, составной части современного естествознания, формирование научного мышления, навыков по практическому использованию теоретических положений, основных законов химии для решения конкретных задач.

Задачами освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии» являются: заложение основ профессиональной подготовки, осуществить переход от качественного описательного изучения химии к количественному, научить применять на практике теоретические положения химии, заложить навыки использования современных вычислительных систем для решения химии и автоматизации математической обработки результатов.

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук
- ПК-3 Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач

- ПК-6 Способен организовывать работу коллектива по решению задач химической направленности

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- Знать: Теоретические основы, закономерности и законы химии (для ПК-1)
- Знать: Роль химии в естествознании, ее связь с другими естественными науками, значение в жизни современного общества (для ПК-1);
- Уметь: работать с компьютером на уровне пользователя с основными требованиями информационной безопасности (для ПК-3);
- Уметь: проводить научный поиск, обработку и анализ научной информации по сформулированной тематике, определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения с построением выводов и предложений (для ПК-3, ПК-6);
- Уметь: применять современные компьютерные технологии решению практических задач химии, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (для ПК-3, ПК-6);
- Уметь: использовать навыки сбора, обработки, хранения, представления химической информации (для ПК-1, ПК-3);
- Уметь: использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики при решении аналитических задач (для ПК-3);
- Владеть: начальными навыками математической обработки химической информации (для ПК-3)
- Владеть: навыками использования современной вычислительной техники по поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений (для ПК-3, ПК-6);
- Владеть современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (для ПК-3, ПК-6).

Содержание дисциплины

4.1. Учебно-тематический план:

Рубеж дисциплины	Шифр раздела, темы дисциплины	Наименование раздела, темы дисциплины	Количество часов по видам учебных занятий	
			Лекции	Лабораторные работы
Рубеж 1	P1	Общие вопросы вычислительных методов	1	4
	P2	Основы метрологических расчетов	2	4
	P3	Дисперсионный анализ	2	10
	P4	Корреляционный и регрессионный анализ	2	8
	P5	Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных	1	10
Рубеж 2	P6	Решение линейных систем	2	8
	P7	Итерационные способы решения систем	2	6
	P8	Основы математического моделирования химических систем	2	8
	P9	Прогнозирование свойств и параметров химических систем	2	6
		ВСЕГО	16	64

4.2. Содержание лекций:

Шифр раздела, темы дисциплины	Наименование раздела, темы дисциплины	Наименование и содержание лекции	Трудовые часы
P1	Общие вопросы вычислительных методов	<p>Математическое моделирование химических систем и процессов.</p> <p>Развитие алгоритмов и программных средств.</p> <p>Соединение знаний химических законов и численных методов решения.</p> <p>Математические основы численных методов решения задач.</p> <p>Решение уравнений, систем уравнений дифференциальных уравнений, интегрирования и дифференцирования.</p>	1
P2	Основы метрологических расчетов	<p>Метрологическое обеспечение производства, практическое применение методов обработки и представления результатов измерений, правил выбора средств измерений для решения конкретных измерительных задач.</p> <p>Рациональный выбор современных средств измерений физических величин при организации и проведении измерительного эксперимента, современных методов исследования метрологических характеристик средств измерений.</p> <p>Использование современных математических методов, применяемых в задачах обработки результатов наблюдений, методов оценивания характеристик электронных средств измерений, справочный аппарат для выбора средств измерений, методов организации измерительного эксперимента, выбора средств измерений для решения конкретных измерительных задач.</p> <p>Выполнение метрологических расчетов при обработке результатов наблюдений измерительного эксперимента.</p> <p>Представление результатов измерений.</p> <p>Использование прикладных программ для обработки результатов измерений. Анализ конкретных ситуаций и решения задач в области метрологической деятельности.</p>	2
P3	Дисперсионный анализ	<p>Однофакторный дисперсионный анализ.</p> <p>Межгрупповая (факторная) и обусловленная различия групп (средних значений), внутригрупповая ошибка.</p>	2

		<p>Парные сравнения. совокупность t-критериев для всех возможных пар градаций. критерий Шеффе. Критерий Бонферрони. Критерий Тьюки. Описательные статистики. Постериорные парные сравнения. Критерий Ливиня.</p> <p>Многофакторный дисперсионный анализ. Дисперсионный анализ с двумя факторами. Влияние ковариат. Графические средства интерпретации взаимодействий. Средний квадрат. F-критерий</p>	
P4	Корреляционный и регрессионный анализ	<p>Матрица данных. Корреляционный анализ. корреляционная зависимость. Ковариация. Регрессионный анализ.</p> <p>Выбор вида уравнения регрессии. Вычисление коэффициентов уравнения регрессии. Проверка адекватности построенной функции</p>	2
P5	Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных	<p>Основы представления графической информации. Построение графиков, схем, презентаций. Представление метрологических данных. Использование интернет источников химической информации. Российские и иностранные базы химической информации. Создание баз данных на основе OpenOffice.Base</p>	1
P6	Решение линейных систем	<p>Постановка задачи. Построение уравнения на основе химических данных.</p> <p>Решение системы линейных уравнений методом Гаусса, методом Крамера, матричным методом.</p>	2
P7	Итерационные способы решения систем	<p>Метод сопряженных градиентов. Метод минимальных невязок. Примеры химических задач, сводимых к решению систем линейных уравнений. Определение состава раствора по его светопоглощению. Аппроксимация ряда точек заданной функцией с параметрами. Интерполяция сплайнами, Регрессионный анализ методом наименьших квадратов (МНК).</p> <p>Линейные и нелинейные математические модели. Нелинейные модели, которые можно свести к линейным. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод простой итерации. Метод Зейделя. Метод Ньютона. Решение задач оптимизации функции нескольких переменных. Метод наискорейшего спуска. Разложение контура полосы поглощения на составляющие полосы.</p>	2

P8	Основы математического моделирования химических систем	Методы численного интегрирования. Методы прямоугольников, трапеций, Симпсона. Квадратурные формулы Гаусса. Числа Котова. Системы ортогональных полиномов (Чебышева, Эрмита, Лягера, Лежандри). Их использование для задач численного интегрирования. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера. Методы Рунге-Кутты 2-го - 4-го порядков. Метод прогноза и коррекции.	2
		Численное решение систем дифференциальных уравнений первого порядка. Сведение решения дифференциальных уравнений высших порядков к решению системы дифференциальных уравнений первого порядка. Решение задач химической кинетики. Последовательные, автокаталитические, цепные процессы. Системы с автоколебаниями концентрации реагирующих веществ.	
P9	Прогнозирование свойств и параметров химических систем	Сольватационные явления. Методы определения сольватных чисел. Электростатическая концепция ион-дипольного взаимодействия и характеристики сольватированных ионов. Равновесия в растворах. Оценка термодинамических констант	2

4.3. Лабораторный практикум

Шифр раздела, темы дисциплины	Наименование раздела, темы дисциплины	Наименование и содержание лабораторных работ	Трудоемкость, часы
P1	Общие вопросы вычислительных методов	Знакомство с базовыми программами для проведения расчетов	4
P2	Основы метрологических расчетов	Решение задач: Дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал, сравнение двух выборок, объединение результатов	4
P3	Дисперсионный анализ	Решение задач: Простой дисперсионный анализ, нахождение источника ошибки, разложение ошибок на составляющие	10
P4	Корреляционный и регрессионный анализ	Решение задач: коэффициент корреляции, метод наименьших квадратов, определение функциональной зависимости, определение систематических ошибок	8

P5	Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных	Построение графиков, схем, презентаций. Оформление метрологических расчетов. Работа с пакетами Chemical tools - графическое представление химических реакций. Знакомство с базами данных, на примере LibreOffice.Base. Использование интернет источников химической информации.	10
PK1	Рубежный контроль 1	Тест по тематике "Расчеты при химическом анализе"	2
P6	Решение линейных систем	Решение задач: Нахождение влияния факторов химической реакции методом матриц, методом Гаусса	8
P7	Итерационные способы решения систем	Решение задач: Метод простой итерации. Метод Зейделя. Метод Ньютона. Решение задач оптимизации функции нескольких переменных	6
P8	Основы математического моделирования химических систем	Численное интегрирование некоторых систем (обработка хроматограмм, данных кинетического анализа). Моделирование структур некоторых соединений в программе Ghemical	8
P9	Прогнозирование свойств и параметров химических систем	Определение теплоты сгорания, теплоты образования и теплоемкости для некоторых структурно-похожих веществ	2
PK 2	Рубежный контроль 2	Вычислительная задача	2

5. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» преподается в течение одного семестра, в виде лекций и лабораторных работ, на которых студенты должны углубить и усовершенствовать свои знания по общим вопросам химии с применением современных компьютерных и вычислительных технологий. Студенты должны закрепить навыки работы на современном вычислительном оборудовании. Студенты должны уметь выбирать методы обработки и моделирования данных анализа для решения конкретной практической химической задачи. Совершенствуются навыки работы с научной периодической литературой, в том числе на иностранных языках, работы в различных системах по поиску научной литературы.

В преподавании курса «Вычислительные методы в химии» применяются образовательные технологии: интерактивная лекция; использование общественных ресурсов: технология проблемного обучения, решение проблемной ситуации с переводением лабораторной работы в разряд исследовательской; лабораторная работа - творческий отчет; технология коллективного взаимодействия.

В процессе чтения лекции преподавателем студент получает информацию по современному состоянию вычислительных методов. Лекционный материал конспектируется с выделением основных вопросов и проблем. Записывается тема лекции, план, основные вопросы, определения, выводы. Студент должен понять основную цель и логическую последовательность материала. Конспект лекций стоит подразделять на пункты и параграфы. Важные места рекомендуется сопровождать замечаниями ("важно", "запомнить", "посмотреть в учебнике"), можно выделять цветом. Конспект лекций рекомендуется просматривать сразу после лекции и возвращаться к нему при подготовке к аудиторным занятиям. Работая над конспектом лекций необходимо использовать учебник и рекомендованную преподавателем литературу.

Лабораторные работы - важнейшая составная часть учебного процесса при подготовке химиков. Студенты на практике изучают вычислительные методы в химии, отрабатывают конкретные методики, используют современное программное обеспечение. При оформлении лабораторной работы надо обозначить тему, цель, приборы и материалы.

Студент должен заранее подготовиться к лабораторной работе, изучить материал и оформить ее. Пропущенную лабораторную работу студент отрабатывает индивидуально. Методички выдаются, как правило, на первом занятии и на весь семестр, согласно методичкам оформляется отчет по работе.

При обработке результатов лабораторных работ рекомендуется использовать такие программные продукты LibreOffice, Ghemial, Chemical tools.

Для текущего контроля успеваемости по очной форме обучения преподавателем используется балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности. Для закрепления и усвоения материала полезно активное участие во всех формах обсуждения и взаимодействия, как на лекциях, так и на лабораторных занятиях.

Самостоятельная работа включает подготовку к лабораторным работам, к рубежным контролям, подготовку к экзамену. В качестве формы рубежного контроля тест и вычислительная задача.

Рекомендуемая трудоемкость самостоятельной работы представлена в таблице:

Рекомендуемый режим самостоятельной работы

Наименование вида самостоятельной работы	Рекомендуемая трудоемкость, акад. час.
Подготовка к лабораторным работам	33
Общие вопросы вычислительных методов	5
Основы метрологических расчетов	4
Дисперсионный анализ	4
Корреляционный и регрессионный анализ	4
Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных	2
Решение линейных систем	4
Итерационные способы решения систем	2
Основы математического моделирования химических систем	4
Прогнозирование свойств и параметров химических систем	4
Подготовка к рубежным контролям (по 20-ти часам на каждый рубеж)	40
Подготовка к экзамену	27
Всего:	100

6. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

6.1. Перечень оценочных средств

1. Балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности студентов в КГУ
2. Отчеты студентов по лабораторным работам
3. Примерный перечень вопросов к рубежным контролям № 1, № 2
4. Перечень вопросов к экзамену

6.2. Система балльно-рейтинговой оценки работы студентов по дисциплине

№	Наименование	Содержание						
		Распределение баллов за 3 семестр						
1	Распределение баллов за семестры по видам учебной работы, сроки сдачи учебной работы (доводятся до сведения студентов на первом учебном занятии)	Вид УР:	Посещение ЛК	Активная работа на лекции	Посещение и защита ЛБ	Рубежный контроль №1	Рубежный контроль №2	Экзамен
		Балльная оценка:	1	1	0,5 - посещение $0,5 \cdot 32 = 16$ 1 - работа $1 \cdot 30 = 30$	9	9	20
		Примечания:	1*8 Всего 8	1*8 Всего 8	16+30 Всего 46	На 9-й неделе	На 15-й неделе	
2	Критерий пересчета баллов в традиционную оценку по итогам работы в семестре и зачет	60 и менее баллов – неудовлетворительно (незачтено); 61...73 – удовлетворительно (зачтено); 74... 90 – хорошо; 91...100 – отлично						
3	Критерии допуска к промежуточной аттестации, возможности получения автоматического зачета (экзаменационной оценки) по дисциплине, возможность получения бонусных баллов	<p>Для допуска к промежуточной аттестации (экзамен) студент должен набрать по итогам текущего и рубежного контроля не менее 50 баллов и должен выполнить все лабораторные работы.</p> <p>Для получения зачета “автоматически” студенту необходимо набрать за семестр 61 балл.</p> <p>По согласованию с преподавателем студенту, могут быть добавлены дополнительные (бонусные) баллы за активное участие в научной и методической работе, за успешное участие в олимпиаде по предмету.</p>						
4	Формы и виды учебной работы для неуспевающих (восстановившихся на курсе обучения) студентов для получения недостающих баллов в конце семестра	<p>В случае если к промежуточной аттестации (зачет) набрана сумма менее 50 баллов, студенту необходимо набрать недостающее количество баллов за счет выполнения дополнительных заданий, до конца последней (зачетной) недели семестра. При этом необходимо проработать материал всех пропущенных лабораторных работ.</p> <p>Формы дополнительных заданий (назначаются преподавателем):</p> <ul style="list-style-type: none"> - выполнение и защита пропущенных лабораторных работ (5 баллов); - разработка творческой экспериментальной работы (5 баллов); - подготовка реферата и презентации (5 баллов). <p>Ликвидация академических задолженностей, возникших из-за разности в учебных планах при переводе или восстановлении, проводится путем выполнения дополнительных заданий, форма и объем которых определяется преподавателем.</p>						

6.3. Процедура оценивания результатов освоения дисциплины

Рубежные контроли проводятся в форме тестового задания и решения вычислительной задачи, экзамен - в устной форме.

Перед проведением каждого рубежного контроля преподаватель прорабатывает со студентами основной материал соответствующих разделов дисциплины в форме краткой лекции-дискуссии.

Примерный перечень вопросов к рубежному контролю №1 порядка 300 тестовых вопросов из которых система автоматически выбирает 16. Рубежному контролю №2 состоит из 30 вычислительных задач из которых случайным выбором выбирается одна.

Перечень вопросов к экзамену включает 20 вопросов. В билет включается два вопроса. Каждый вопрос максимально оценивается в 10 баллов. Время, отводимое студенту для подготовки к экзамену, составляет 60 минут.

Результаты текущего контроля успеваемости и экзамена заносятся преподавателем в экзаменационную ведомость, которая сдается в организационный отдел института в день экзамена, а также выставляются в зачетную книжку студента.

6.4. Примеры оценочных средств для рубежных контролей и экзамена

Перечень вопросов к экзамену

1. Математическое моделирование химических систем и процессов в химии. Современное развитие алгоритмов и программных средств в химии
2. Соединение знаний химических законов и численных методов решения. Математические основы численных методов решения задач.
3. Решение уравнений, систем уравнений дифференциальных уравнений, интегрирования и дифференцирования применительно к химическим процессам.
4. Метрологическое обеспечение производства, практическое применение методов обработки и представления результатов измерений, правил выбора средств измерений для решения конкретных измерительных задач.
5. Рациональный выбор современных средств измерений физических величин при организации и проведении измерительного эксперимента, современных методов исследования метрологических характеристик средств измерений.
6. Использование современных математическим методов, применяемых в задачах обработки результатов наблюдений, методов оценивания характеристик электронных средств измерений, справочный аппарат для выбора средств измерений, методов организации измерительного эксперимента, выбора средств измерений для решения конкретных измерительных задач.
7. Выполнение метрологических расчетов при обработке результатов наблюдений измерительного эксперимента. Представление результатов измерений.
8. Однофакторный дисперсионный анализ. Межгрупповая (факторная) и обусловленная различия групп (средних значений), внутригрупповая ошибка.
9. Парные сравнения. совокупность t-критериев для всех возможных пар градаций. критерий Шеффе. Критерий Бонферрони. Критерий Тьюки. Описательные статистики. Постериорные парные сравнения. Критерий Ливиня.
10. Многофакторный дисперсионный анализ. Дисперсионный анализ с двумя факторами. Влияние ковариат. Графические средства интерпретации взаимодействий. Средний квадрат. F-критерий
11. Матрица данных. Корреляционный анализ. Корреляционная зависимость. Ковариация.
12. Регрессионный анализ. Выбор вида уравнения регрессии. Вычисление коэффициентов уравнения регрессии.
13. Регрессионный анализ методом наименьших квадратов (МНК). Проверка адекватности построенной функции.
14. Основы представления графической информации. Построение графиков, схем, презентаций. Представление метрологических данных. Использование интернет источников химической информации. Российские и иностранные базы химической информации.
15. Решение системы линейных уравнений методом Гаусса, методом Крамера, матричным методом.
16. Метод сопряженных градиентов. Метод минимальных невязок. Примеры химических задач, сводимых к решению систем линейных уравнений. Определение состава раствора по его светопоглощению. Аппроксимация ряда точек заданной функцией с параметрами. Интерполяция сплайнами.

17. Линейные и нелинейные математические модели. Нелинейные модели, которые можно свести к линейным. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод простой итерации.

18. Метод Зейделя. Метод Ньютона. Решение задач оптимизации функции нескольких переменных. Метод наискорейшего спуска. Разложение контура полосы поглощения на составляющие полосы.

Методы численного интегрирования. Методы прямоугольников, трапеций, Симпсона. Квадратурные формулы Гаусса. Числа Котова. Системы ортогональных полиномов (Чебышева, Эрмита, Ляггера, Лежандри). Их использование для задач численного интегрирования.

19. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера. Методы Рунге-Кутты 2-го - 4-го порядков. Метод прогноза и коррекции.

Численное решение систем дифференциальных уравнений первого порядка. Сведение решения дифференциальных уравнений высших порядков к решению системы дифференциальных уравнений первого порядка.

20. Решение задач химической кинетики. Последовательные, автокаталитические, цепные процессы. Системы с автоколебаниями концентрации реагирующих веществ.

Сольватационные явления. Методы определения сольватных чисел. Электростатическая концепция ион-дипольного взаимодействия и характеристики сольватированных ионов.

Равновесия в растворах. Оценка термодинамических констант

Примерный тест:

К Рубежному контролю 1:

1. По формуле $t_b = |1-b|/s_b$ определяют:

- a) постоянную систематическую ошибку
- b) переменную систематическую ошибку
- c) случайную ошибку
- d) инструментальную ошибку

2. В формуле $S = \dots$, S – это:

- a) дисперсия
- b) абсолютная ошибка
- c) стандартное отклонение
- d) доверительный интервал

3. При отсутствии зависимости между двумя переменными коэффициент корреляции принимает значение:

- a) 1
- b) -1
- c) 0
- d) $1/2$

4. При $r = -0,5$ зависимость между двумя величинами является:

- a) мягкой отрицательной
- b) жесткой положительной
- c) жесткой отрицательной
- d) мягкой положительной

5. По формуле $t_a = |a|/s_a$ определяют:

- a) постоянную систематическую ошибку
- b) переменную систематическую ошибку
- c) случайную ошибку
- d) инструментальную ошибку

6. Для определения постоянной систематической ошибки используют следующую формулу:

- a) $t_b = |1-b|/s_b$
- b) $t_a = |a|/s_a$

c) $t_s =$

7. Распределение Пирсона имеет вид:

a) $y =$

b) $Y =$

c)

8. При жесткой положительной зависимости между двумя переменными коэффициент корреляции принимает значение:

a) 1

b) -1

c) 0

d) $\frac{1}{2}$

9. Систематические погрешности появляются в результате:

a) неустраняемых причин, причины которых не известны

b) постоянно действующей причиной, которая может быть выявлена и устранена

c) небрежности и некомпетентности аналитика

d) измерения с помощью приборов

10. Распределение Пуассона позволяет работать:

a) с относительными величинами

b) с постоянными величинами

c) с непрерывными величинами

d) с дискретными величинами

11. Сравнить два средних значения позволяет критерий:

a) t - критерий

b) Q - критерий

c) F - критерий

d) χ^2 - критерий

12. Стандартное отклонение рассчитывается по следующей формуле:

a) $S =$

b) $\Delta x =$

c) $F =$

d) $Q =$

13. Из раствора с концентрацией натрия 10^{-3} % требуется получить растворы с концентрацией натрия 10^{-4} %. При использовании 5 - миллиметровой пипетки 100-миллилитровой мерной колбы. Рассчитайте ошибку разбавления ($\sigma_p(\text{колбы}) = 0,1$; $\sigma_p(\text{пипетки}) = 0,1$).

a) 0,02

b) 0,04

c) 0,06

d) 0,03

14. При установке титра 0,1 н раствора KMnO_4 берут навеску оксалата натрия 420 мг, на титрование идет 45 мл раствора KMnO_4 . Вычислить ошибку ($\sigma(\text{бюретки}) = 0,05$; $\sigma(\text{аналитических весов}) = 0,00005$).

a) 0,0022

b) 0,0017

c) 0,0011

d) 0,0031

15. Для проверки линейности функции используют следующую формулу:

a) $t_s =$

b)

c) $F =$

d)

16. Коэффициент корреляции рассчитывается по следующей формуле:

a)

b)

c)

d)

17. Из раствора с концентрацией натрия 10^{-2} % требуется получить растворы с концентрацией натрия 10^{-3} %. При использовании 10 - миллиметровой пипетки 100-миллилитровой мерной колбы. Рассчитайте ошибку разбавления. ($\sigma_p(\text{колбы}) = 0,1$; $\sigma_p(\text{пипетки}) = 0,2$).

a) 0,02

b) 0,04

c) 0,06

d) 0,03

18. При $r = -1$ зависимость между двумя величинами является:

a) мягкой отрицательной

b) жесткой положительной

c) жесткой отрицательной

d) мягкой положительной

19. Случайная ошибка влияет на:

a) воспроизводимость результата

b) правильность результата

c) и на воспроизводимость и на правильность результата

d) не влияет на выше перечисленные характеристики

20. Инструментальные погрешности появляются в результате:

a) неустранимых причин, причины которых не известны

b) постоянно действующей причиной, которая может быть выявлена и устранена

c) небрежности и некомпетентности аналитика

d) измерения с помощью приборов

Примерные задачи к рубежному контролю 2:

1) Для анализа стали на Mn, построили градуировочный график (x - %, y - плотность почернения пластинки):

x	0,72	0,84	0,96	1,08	1,20	1,32	1,44	1,56	1,68
y	30,17	34,30	38,91	43,98	47,14	52,83	57,47	59,14	65,29

Проверьте функцию на линейность.

2) Содержание Са в образце определялось двумя методами:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
фотометрически	19,19	19,27	19,25	19,16	19,22	19,17	19,23	19,19	19,25	19,17
титриметрически	19,11	19,19	19,23	19,13	19,17	19,14	19,19	19,20	19,13	19,16

Можно ли объединить результаты? Если нельзя: постройте гистограммы для каждого метода, если можно: то объедините результаты и постройте гистограмму для объединенного результата.

3) Для контроля качества пластмассы проводили анализ на упругость (y мН/см²) и содержание фенолформальдегидной смолы (x %) течением смены. Были получены результаты:

x	y	x	y	x	y	x	y
30,24	216,58	23,40	170,05	35,76	241,96	27,08	191,20
31,68	228,84	23,83	171,74	35,69	241,53	26,24	185,27
29,87	209,81	24,66	176,39	35,20	241,11	26,39	185,70
31,90	228,00	26,09	184,01	36,78	259,30	26,00	184,01
33,77	238,15	27,47	194,16	34,21	235,61	26,82	190,77
27,00	190,77	25,73	188,66	32,57	226,73	29,47	203,89
29,45	206,42	25,63	188,24	32,48	225,88	29,20	203,46
25,37	180,62	27,47	193,73	31,74	217,42	27,74	200,08
23,47	169,62	29,47	209,39	30,94	217,00	25,43	186,97
22,49	167,09	31,03	222,08	29,08	208,12	26,09	189,08

Существует ли связь между величинами x и y ? Проверьте расчетным и графическим способом.

4) Пять лабораторий проводили анализ на содержание (в %) окислов марганца в воздухе рабочей зоны завода Л. Результаты представлены ниже:

1	2	3	4	5
---	---	---	---	---

3,61	3,41	3,53	3,63	3,61
3,57	3,37	3,55	3,59	3,59
3,43	3,49	3,45	3,65	3,53
3,39	3,59	3,39	3,35	3,65
3,55	3,43	3,41	3,49	3,57
3,53		3,37	3,41	3,51
		3,49	3,45	3,55
		3,53	3,51	
		3,65	3,45	
			3,41	

Можно ли объединить результаты опытов? Если нет найдите лабораторию(и) которые(е)а совершил(и)а промахи.

5) Определите возможные систематические ошибки (x – эталон, y – результат анализа):

x	61	62	64	65	66	67	68	70	71	72	73
y	67,92	68,52	69,96	71,28	72,36	73,68	75,12	76,68	77,64	79,56	81,00

6) Для определения S_r в минерале было взято m=6 проб (результаты определения в таблице, %). Каждый анализ проведен 2 раза. Определить наличие ошибки пробоотбора. Если таковая имеется, рассчитать её.

1	2	3	4	5	6
6,20	6,39	6,24	6,39	6,02	6,20
6,37	6,60	6,02	6,31	5,97	6,25

7) Для анализа содержания мангана в минерале было взято q=10 проб (шаг А). Каждая проба была разбита на p=2 конечные пробы (m=pq=10*2=20) (шаг В). Каждую пробу измеряли 2 раза (в таблице, %) (шаг С).

a1		a2		a3		a4		a5		a6		a7		a8		a9		a10	
b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2	b1	b2
25,59	25,51	26,38	26,15	25,23	25,37	26,40	26,52	25,84	26,10	25,65	25,68	26,01	25,62	25,59	25,51	26,38	26,15	25,23	25,37
25,87	25,73	25,84	26,01	25,34	25,70	26,68	26,12	25,76	26,07	25,76	25,82	26,07	25,54	25,87	25,73	25,84	26,01	25,34	25,70

8) Для анализа стали А16 на Ni, построили градуировочный график (x - %, y – плотность почернения пластинок):

x	0,4	0,6	0,8	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2
y	15,55	18,33	20,88	23,07	26,15	29,20	32,02	33,95	36,95

Проверьте функцию на линейность.

9) Содержание Ni в образце определялось двумя методами:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
фотометрически	33,45	34,65	33,66	33,17	35,00	34,50	34,01	33,66	32,85	34,27
титриметрически	34,30	35,29	33,30	32,67	33,11	33,01	33,74	34,21	33,30	33,68

Можно ли объединить результаты? Если нельзя: постройте гистограммы для каждого метода, если можно: то объедините результаты и постройте гистограмму для объединенного результата.

10) Для мониторинга качества мучной продукции определяли содержание (x в %) белков в хлебном изделии и твердость изделия (y мкН/см²). Были получены результаты:

x	y	x	y	x	y	x	y
5,86	96,77	4,53	75,98	6,93	108,11	5,25	85,43
6,14	102,25	4,62	76,73	6,91	107,92	5,08	82,78
5,79	93,74	4,78	78,81	6,82	107,73	5,11	82,97
6,18	101,87	5,05	82,22	7,13	115,86	5,04	82,22
6,54	106,41	5,32	86,75	6,63	105,27	5,20	85,24
5,23	85,24	4,98	84,29	6,31	101,30	5,71	91,10
5,70	92,23	4,97	84,11	6,29	100,93	5,66	90,91

4,91	80,70	5,32	86,56	6,15	97,15	5,38	89,40
4,55	75,79	5,71	93,56	5,99	96,96	4,93	83,54
4,36	74,66	6,01	99,23	5,63	92,99	5,05	84,48

Существует ли связь между величинами x и y ? Проверьте расчетным и графическим способом.

11) Шесть экспертных групп проводили анализ на содержание (в %) брома в минерале. Результаты представлены ниже:

1	2	3	4	5	6
5,4027	5,1106	5,2854	5,4326	5,4027	5,3452
5,3452	5,0531	5,3153	5,3728	5,3728	5,0531
5,1405	5,2279	5,1704	5,4625	5,2854	5,0531
5,0807	5,3452	5,0807	5,0232	5,4625	5,4625
5,3153	5,1106	5,1106	5,2279	5,3452	5,3153
5,2854		5,0531	5,1405	5,2578	5,4625
		5,2279		5,3153	5,3728
		5,1405			

Можно ли объединить результаты опытов? Если нет найдите групп(ы)у которы(е)а совершил(и)а промахи.

6.5. Фонд оценочных средств

Полный банк заданий для текущего, рубежных контролей и промежуточной аттестации по дисциплине, показатели, критерии, шкалы оценивания компетенций, методические материалы, определяющие процедуры оценивания образовательных результатов, приведены в учебно-методическом комплексе дисциплины.

7. Основная и дополнительная учебная литература

7.1. Основная литература

1. Дерффель К. Статистика в аналитической химии = Statistik in der analytischen Chemie / К. Дерффель. М: Мир, 1994. - 267
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов.-М.:ИКЦ «Академкнига», 2006.- 416 с.
3. Основы аналитической химии: Задачи и вопросы: учебное пособие для студентов университетов, химико-технологических, педагогических, сельскохозяйственных, медицинских и фармацевтических вузов / под ред. Ю. А. Золотова. - Москва: Высшая школа, 2002. - 412 с.
4. Турчак Л.И. Основы численных методов: учеб. пособие / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 304 с.
5. Джонсон К. Численные методы в химии. - М.: Мир, 1983. — 503 с.

7.2. Дополнительная литература

1. Хохлов, А. Г.. Математические методы и компьютерные технологии в науке и образовании: учебное пособие / А. Г. Хохлов; Тюм. гос. ун-т. - Тюмень : Изд-во ТюмГУ, 2013. - 436 с.
2. Гармаш, А.В. Метрологические основы аналитической химии. [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.В. Гармаш, Н.М. Сорокина. – М.: Московский государственный университет, 3 изд. 2012. - 48с. - Режим доступа: 1) www.chem.msu.ru/rus/teaching/analyt/garmasch.pdf (дата обращения: 01.10.2014), 2) <http://anchem.ru/literature/books/chemmetr.pdf>

3. Эберт К. Компьютеры. Применение в химии / К. Эберт, Х. Эдерер ; пер. с нем. А.Е. Гохмана ; под. ред. Н.С. Зефинова. – М. : Мир, 1988. – 415 с.
4. Мэтьюз Д. Численные методы. Использование MATLAB : учебное издание / Д. Мэтьюз, К. Финк ; пер. с англ. Л.Ф. Козаченко ; под. ред. Ю.В. Козаченко. – М. : Изд. дом Вильямс, 2001. – 720 с. : ил.
5. Турчак Л.И. Основы численных методов: учеб. пособие / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 304 с.
6. Формалев В.Ф. Численные методы: учебник / В.Ф. Формалев, Д.Л. Ревизников ; под ред. А.И. Кибзуна. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 400 с.
7. Эберт К. Компьютеры. Применение в химии / К. Эберт, Х. Эдерер ; пер. с нем. А.Е. Гохмана ; под. ред. Н.С. Зефинова. – М. : Мир, 1988. – 415 с.

8. Ресурсы сети “Интернет”, необходимые для освоения дисциплины

№	Интернет-ресурс	Краткое описание
1	http://znanium.com/catalog.php	Электронно-библиотечной система
2	http://xumuk.ru/	Сайт о химии
3	http://chemport.ru/	Портал для химиков
4	www.chem.msu.su/rus/teaching/analyt	Учебные материалы
5	http://anchem.ru/	Портал химиков-аналитиков. Специализированная литература, нормативная документация, материалы аналитического и химического форума ANCHEM.RU, личный опыт авторов.
6	http://elementy.ru	Энциклопедический сайт
7	http://www.msu.ru	Сайт Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова
8	http://www.edu.ru/	Федеральный портал «Российское образование»
9	http://ru.wikipedia.org	Энциклопедия Википедия
10	http://kgsu.ru/	Сайт Курганского государственного университета

9. Информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

При чтении лекций используются слайдовые презентации.

Минимальные требования к операционной системе и программному обеспечению компьютера, используемого при показе слайдовых презентаций: Windows XP, Foxit Reader Pro версия 1.3.

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Занятия проводятся в компьютерном классе кафедры. Компьютерный класс, мультимедийное оборудование (переносной персональный компьютер, мультимедийный проектор, мультимедийный экран).

Аннотация к рабочей программе дисциплины

“Вычислительные методы в химии”

Образовательной программы высшего образования
программы специалитета
04.05.01 - “Фундаментальная и прикладная химия”
направленность (профиль) **“Аналитическая химия”**

Трудоемкость дисциплины: 5 ЗЕ (180 академических часов)

Семестр: 3 (очная форма обучения)

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Содержание дисциплины

Теоретические основы вычислительных методов в химии. Общие вопросы вычислительных методов. Основы метрологических расчетов. Дисперсионный анализ. Корреляционный и регрессионный анализ. Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных. Решение линейных систем. Итерационные способы решения систем. Основы математического моделирования химических систем. Прогнозирование свойств и параметров химических систем