

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

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

Химический факультет
Кафедра физической химии



УТВЕРЖДАЮ

проректор

П.А. Машаров

«29» марта 2024 г.

МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Укрупненная группа направлений подготовки	04.00.00 Химия
Программа высшего образования	Программа специалитета
Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Квалификация	Химик. Преподаватель химии
Форма обучения	Очная

Рабочая программа адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2024

Рабочая программа дисциплины «**Вычислительные методы в химии**» для обучающихся по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:
заведующий кафедрой физической химии,
д-р. хим. наук

В. М. Михальчук

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры физической химии.
Протокол от 26.03.2024 г. № 14

Заведующий кафедрой

В. М. Михальчук

СОГЛАСОВАНО:

Декан химического факультета
28.03.2024 г.

С. Г. Бахтин

Учебно-методическая комиссия химического факультета
Протокол от 27.03.2024 г. № 2.
Председатель

Р. И. Лыга

Руководитель основной профессиональной
образовательной программы,
канд. хим. наук, доц.
28.03.2024 г.

О. В. Баранова

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы специалитета: Информатика, Математика, Физика, Физическая химия.

1.2. дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

Химическая технология, Компьютерные технологии в науке и образовании, Кинетика и термодинамика ферментативных процессов, Методы разделения и концентрирования в химическом анализе, Методы анализа природных и промышленных объектов, Учебная практика: ознакомительная (обязательная), Производственная практика: преддипломная (обязательная), Производственная практика: технологическая (обязательная), Производственная практика: научно-исследовательская работа (обязательная).

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (Программа специалитета)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ОД.1 Вычислительные методы в химии
Часть образовательной программы	Вариативная часть: безальтернативные дисциплины
Количество зачетных единиц / всего часов	6/ 216

2.2. Распределение часов по формам и периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы + контроль	всего	
Очная	3	6	51	34	–	131	216	зачет
Очная, всего								
Заочная								

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Подготовка специалистов-химиков, которые умеют применять возможности современных методов математической обработки данных для решения практических задач и, в частности, статистической обработки химического эксперимента. Формирование у специалиста-химика практических навыков анализа экспериментальных данных и их интерпретации.

**4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ
ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ ИНДИКАТОРЫ
И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
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-3.2. Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2.1 Знает: – теоретические основы статистической обработки результатов измерения и наблюдения; – методики проведения анализа экспериментальных данных с применением статистических программ JASP и PAST. ОПК-3.2.2 Умеет: – определять базовые статистики результатов измерений; – проводить проверку статистических гипотез; – проводить однофакторный линейный регрессионный и корреляционный анализ.

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Описательные статистики результатов измерений. Статистические гипотезы и их проверка.	
1. Характеристики эмпирических распределений	Цели и задачи статистической обработки. Погрешность измерений, основные виды погрешности: математическая модель, промахи, при обработке, аппаратные коэффициенты, систематические и случайные. Случайный характер экспериментальных данных и их представления: гистограммы, полигон частот, двумерные данные. Вычисление характеристик эмпирических распределений: начальные и центральные моменты, выборочное среднее, дисперсия, среднеквадратическое отклонение, коэффициенты вариации. Определение описательных статистик экспериментальных данных с применением статистических программ JASP и PAST.
2. Эмпирические и теоретические распределения	Основные типы эмпирических распределений и их свойства. Нормальное распределение, распределения Стьюдента, Фишера, χ^2 -распределение.
3. Статистические гипотезы	Общие принципы проверки статистических гипотез, нуль-гипотеза и альтернативная гипотеза, критическая область, ошибки первого и второго рода, мощность статистического критерия. Критерии оценки статистических гипотез в задачах обработки экспериментальных данных, уровень значимости критерия и выбор его величины.
4. Проверка	Проверка статистических гипотез: нормального

статистических гипотез	распределения; однородности распределения; наличие систематического сдвига математического ожидания; проверка однородности результатов параллельных опытов, методы отсева грубых погрешностей в т.ч. в двумерных выборках. Проверка статистических гипотез с применением статистических программ JASP и PAST.
5. Доверительный интервал.	Случайная ошибка, доверительная вероятность, доверительный интервал для единичного измерения и для выборочного среднего. Определение доверительных интервалов с применением статистических программ JASP и PAST.
Раздел 2. Линейный регрессионный и корреляционный анализ.	
6. Однофакторный линейный регрессионный анализ.	Регрессионный анализ. Условия, определяющие возможность получения математических моделей методом наименьших квадратов.
7. Регрессионный анализ для случая, когда каждому значению независимой переменной соответствует одно значение зависимой переменной.	Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции: определение параметров регрессии по экспериментальным данным; остаточная дисперсия и дисперсия параметров, оценка доверительных интервалов. Проверка значимости уравнения регрессии и его коэффициентов. Анализ остатков, основные типы трендов. Проведение регрессионного анализа с применением статистических программ JASP.
8. Регрессионный анализ для случая, когда каждому значению независимой переменной соответствует несколько значений зависимой переменной.	Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции: определение параметров регрессии по экспериментальным данным; остаточная дисперсия и дисперсия параметров, оценка доверительных интервалов. Проведение регрессионного анализа с применением статистических программ JASP.
9. Парный линейный корреляционный анализ.	Парная корреляция, статистическое оценивание парной корреляции. Прямая и обратная регрессия, коэффициент корреляции и детерминации. Корреляционный анализ эмпирических данных, выборочный коэффициент парной корреляции. Доверительные оценки эмпирического коэффициента корреляции. Проведение корреляционного анализа с применением статистических программ JASP.
10. Множественный линейный корреляционный и регрессионный анализ.	Анализ множественной корреляции, коэффициенты корреляции и детерминации. Сводные и частные коэффициенты корреляции. Множественная линейная регрессия.

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 3, семестр – 6

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Описательные статистики результатов измерений. Статистические гипотезы и их проверка.	21	16		61	98
1. Характеристики эмпирических распределений	4	4		12	20
2. Эмпирические и теоретические распределения	4	4		12	20
3. Статистические гипотезы	4			13	17
4. Проверка статистических гипотез	6	8		14	28
5. Доверительный интервал.	3			10	13
Раздел 2. Линейный регрессионный и корреляционный анализ.	30	18		70	118
6. Однофакторный линейный регрессионный анализ.	4			12	16
7. Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат.	8	6		14	28
8. Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат.	8	8		16	32
9. Парный линейный корреляционный анализ.	6			14	20
10. Двухфакторный линейный корреляционный и регрессионный анализ.	4	4		14	22
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	51	34	0	131	216

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

1. Что такое истинное значение физической величины?
2. Что такое эмпирическое значение физической величины?
3. Дать определение погрешности (ошибки) измерения?
4. Дать определение действительному значению измеряемой величины. Какие значения могут считаться действительными?
5. Дать краткую характеристику погрешностям измерений по возможности их реализации.
6. Дать краткую характеристику погрешностям измерений по закономерностям их появления.
7. Дать краткую характеристику погрешностям измерений по форме их числового представления.

8. Перечислить причины случайного характера экспериментальных данных. Что такое статистические величины?
9. Дать определение случайной величине.
10. Что такое генеральная совокупность?
11. Что такое выборка?
12. Что такое одномерные данные?
13. Что такое вариационный и атрибутивный ряды данных?
14. Что такое класс? Что такое интервал?
15. Как определить число классов и их ширину? Какое число классов считается приемлемым?
16. Что такое частота и частость попадания результатов эксперимента в заданный интервал?
17. Что такое накопленная частота и накопленная частость?
18. Как построить распределение экспериментальных данных в зависимости от частоты их появления в виде гистограммы? полигона частот (частостей)? полигона накопленных частот (частостей)?
19. Представьте основные виды гистограмм. О чем свидетельствует их форма?
20. Что такое дву- и многомерные данные?
21. Дать характеристику средним значениям случайной величины?
22. Дать характеристику параметрам меры разброса данных.
23. Что такое кажущаяся асимметрия?
24. Что такое истинная асимметрия?
25. Дать характеристику величине ρ .
26. Дать характеристику величине ϵ .
27. Гауссово (нормальное) распределение. Доверительная вероятность.
28. Распределение Пуассона.
29. Распределение Стюдента.
30. Доверительный интервал для среднего. Правила округления результатов эксперимента.
31. Распределение Фишера.
32. χ^2 – распределение.
33. Понятие статистической гипотезы. Ошибки первого и второго рода.
34. Критерии оценки статистической гипотезы. Уровень значимости.
35. Проверка гипотезы однородности результатов параллельных опытов. t -критерий.
36. Гипотеза о принадлежности выборки к нормальному распределению. Критерий Колмогорова-Смирнова.
37. Проверка равнозначности данных в двух выборках. Гипотеза однородности дисперсий. Критерий Фишера.
38. Проверка равнозначности данных в нескольких выборках одинакового объема. Гипотеза однородности дисперсий. Критерий Кохрена.
39. Проверка равнозначности данных в нескольких выборках разного объема. Гипотеза однородности дисперсий. Критерий Бартлетта.
40. Проверка гипотезы о равенстве двух математических ожиданий. Критерий Стюдента.
41. Алгоритм статистической обработки результатов эксперимента для одной выборки данных.
42. Алгоритм статистической обработки результатов эксперимента для двух выборок данных.
43. Алгоритм статистической обработки результатов эксперимента для нескольких выборок данных.
44. Решить задачи на установление однородности данных, нормального распределения, равнозначности и возможности объединения выборок в одну совокупность данных.

45. Понятие регрессионного анализа. Допущения, лежащие в его основе. Определение параметров уравнение регрессии по экспериментальным данным.
46. Оценка адекватности линейной модели. Остаточная дисперсия. Коэффициенты корреляции и детерминации.
47. Оценка доверительного интервала («коридора ошибок») для искомой функциональной зависимости. Исключение выпадающих значений.
48. Проверка статистической значимости параметров уравнения регрессии с помощью критерия Стьюдента.
49. Вычисление случайных ошибок и доверительного интервала для параметров регрессии.
50. Расчёт доверительного интервала для результатов не прямых измерений.
51. Проверка гипотезы однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции (в случае нескольких ординат функции).
52. Проверка гипотезы линейности исследуемой функциональной зависимости. Критерий Фишера.
53. Расчёт доверительного интервала для исследуемой зависимости (в случае нескольких ординат функции).
54. Проверка статистической значимости параметров b_0 и b_1 (в случае нескольких ординат функции).
55. Расчёт случайной ошибки и доверительного интервала для b_0 и b_1 (в случае нескольких ординат функции).

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

8.1. Форма обучения – очная, курс – 3, семестр – 6

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
Раздел 1	Организационно-учебная работа студента в аудитории	5
	Самостоятельная работа	5
	Текущий контроль	15
ИТОГО		25
Раздел 2	Организационно-учебная работа студента в аудитории	5
	Самостоятельная работа	5
	Текущий контроль	15
ИТОГО		25
Зачет		50
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет

90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D		зачтено
60-69	E	удовлетворительно	зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
 - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа;
 - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
 - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - письменные задания выполняются на компьютере;
 - экзамен проводится в устной форме или выполняется в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - в печатной форме увеличенным шрифтом;
 - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в 9 корпусе ДонГУ (г. Донецк, ул. Щорса, 17а). Для проведения лабораторных занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Лабораторные занятия проводятся в лаборатории «Компьютерные технологии и молекулярное моделирование» (компьютерный класс), оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, доской.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете Главного корпуса (ауд. 405).

При изучении дисциплины применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии. С использованием компьютерных технологий дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

11.1. Основная литература

1. Бородин, А. В. Статистическая обработка данных [Электронный ресурс]: А. В. Бородин. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий. – 2022. – 96 с. <https://elibrary.ru/item.asp?id=53754964>.
2. Мастеренко, Д.А. Прямые измерения. Статистическая обработка результатов [Электронный ресурс]: Д. А. Мастеренко. – М: «Издательские решения». – 2020. – 102 с. <https://elibrary.ru/item.asp?id=42428853>.
3. Живописцев Ф.А., Иванов В.А. Регрессионный анализ в экспериментальной физике. – М.: Изд-во МГУ. 1995. – 208 с.
4. Боровиков В.П., Боровиков И.П. STATISTICA. Статистический анализ и обработка данных в среде Windows. – М.: Информационно-издательский дом "Филин", 1997. - 608 с.
5. Спиридонов В.П., Лопаткин А.А. Математическая обработка физико-химических данных. -М: МГУ. 1970. - 222 с.
6. Статистичні методи у хімії: Підручник для студентів хімічних спеціальностей вищих навчальних закладів [Текст] / О. В. Іщенко, В. М. Михальчук, Н. І. Біла [та ін.] – Донецьк: Видавництво ДонНУ, 2012. – 504 с. (з грифом МОН, лист № 1/11-5169 від 17.04.12).

11.2. Дополнительная литература

7. Дерффель К. Статистика в аналитической химии. -М. :Мир. 1994. - 268 с.
8. Статистична обробка хімічного експерименту у прикладах: навчально-методичний посібник / В.М. Михальчук, Н.І. Біла, О.В. Білий / Донецьк: ДонНУ, 2011 – 207 с.
9. Линейный регрессионный анализ результатов химического эксперимента в системе STATISTICA. Учебно-методическое пособие / В.М. Михальчук, А.В. Михальчук / Донецк: ДонНУ, 2002. – 66 с.
10. Выполнение самостоятельных работ по курсу “Статистическая обработка эксперимента в химии” (Методическое пособие для студентов специальности 7.070301). / В.М. Михальчук. Донецк, ДонНУ, 2003 –56 с.

11. Статистична обробка експерименту в хімії. Навчально-методичний посібник В.М. Михальчук, Н.І. Біла / Донецьк: ДонНУ, 2006. – 116 с.

12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. Анализ числовых экспериментальных данных в химии: дистанционный курс. – URL: <https://moodlephyschemistrydonnudsonetsk.moodlecloud.com/course/view.php?id=11> (дата обращения: 01.01.2023) – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.
2. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ; Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.
3. **eLIBRARY.RU:** научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
4. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка»: сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/>. – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
5. Электронно-библиотечная система «Лань»: [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
6. **ЭБС Юрайт:** электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://biblio-online.ru> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
7. **Электронно-библиотечная система ДонГУ:** сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
8. **Электронный каталог** Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.
9. **Электронный архив ДонГУ:** раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный.

13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).