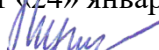
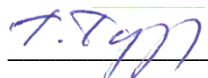


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 5 от «24» января 2022 г.
Зав. кафедрой  /Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
 /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина
Персональные компьютеры в химии

Часть, формируемая участниками образовательных отношений

программа бакалавриата

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Профиль(и) подготовки

Аналитическая химия;

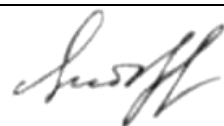
Высокомолекулярные соединения;

Органическая и биоорганическая химия;

Физическая химия;

Квалификация

Бакалавр

<p>Разработчик (составитель) <u>Проф., д-р хим. наук, профессор</u> (должность, ученая степень, ученое звание)</p>	<p> _____/ <u>Янборисов В.М.</u> (подпись, Фамилия И.О.)</p>
--	--

Для приема: 2022 г.

Уфа 2022 г.

Составитель / составители: Янборисов В.М.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 5 от «24» января 2022 г.

Заведующий кафедрой



/ Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	4
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	5
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	5
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	6
4.3. Рейтинг-план дисциплины	16
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	17
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	17
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	17
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	19

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Представленные результаты профессиональной деятельности	ПК-5. Способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	ПК-5.1 Знать возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Знать: возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов
		ПК-5.2. Уметь применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Уметь: применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов
		ПК-5.3. Владеть навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Владеть: навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Персональные компьютеры в химии» относится к части, участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3 семестре.

Цель изучения дисциплины: приобретение знаний, умений и навыков использования компьютеров для изучения и исследования химических процессов.

При освоении данной дисциплины требуются знания, умения и навыки, приобретённые в результате освоения предшествующих дисциплин: математика, информатика, физика, иностранный язык.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ПК-5.** Способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ПК-5.1 Знать возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Знать: возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Не знает	В полной мере знает возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов
ПК-5.2. Уметь применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Уметь: применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Не умеет	В полной мере умеет применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов
ПК-5.3. Владеть навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Владеть: навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Не владеет	В полной мере владеет навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов

дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-5.1 Знать возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Знать: возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Индивидуальный, групповой опрос, лабораторные работы, решение типовых задач,
ПК-5.2. Уметь применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Уметь: применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	индивидуальные творческие задания, коллоквиумы, тестирование
ПК-5.3. Владеть навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Владеть: навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	

Лабораторное занятие 1. Построение графиков функций с использованием табличных процессоров Calc и Excel

Задание 1. Построить график функции на промежутке аргумента [a,b], принимая $\Delta x = (b-a)/10$.

$a=N-5$, $b=N+5$, где N – номер варианта

$y = \ln(N^2 + e^{-x})$, $x < N$

$y = 2^{N/2} + (2,3)^{-3x}$, $x \geq N$

Задание 2. Рассчитать значения и построить график функции, определенной на прямоугольнике $D=[a,b]*[c,d]$, принимая $\Delta x = (b-a)/10$, $\Delta y = (d-c)/10$.

$z = \lg(Ne^{-x}) * \cos(Ny)$, $D=[1,3]*[-\pi/2N, 3\pi/2N]$

Лабораторное занятие 2. Нахождение погрешностей функции в табличных процессорах Calc и Excel

Рассчитать тремя различными способами погрешности функций $y(x)$ и $z(x)$ на заданных промежутках

Задание 1. Вычислить погрешности функции $y(x) = e^{Nx/10}$ на промежутке $[-2,0; -1,8]$, $\Delta x^* = -0,1$ $x^* = -1,9$, где N – номер варианта

Задание 2. Вычислить погрешности функции $z(x,y) = x*y$ на прямоугольнике [-

$N; N+1][1,2;1,4]. \Delta x^* = -0,5 \quad x^* = -N+0,5, \Delta y^* = 0,1 \quad y^* = 1,3.$

Лабораторное занятие 3. Численные методы решения уравнений с использованием табличных процессоров Calc и Excel

Известно, что вещество С расходуется в мономолекулярной реакции с константой скорости $k=8,2 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$. Начальное значение концентрации вещества С равно $N \cdot 10^{-2}$. Определить аналитическую зависимость для концентрации вещества С от времени реакции и найти такое время, при котором значение концентрации вещества С было бы равно $N \cdot 10^{-3}$.

Лабораторное занятие 4. Аппроксимация функций с использованием табличных процессоров Calc и Excel

А) Экспериментальные данные по скорости реакции W в зависимости от концентрации C представлены в таблице:

$C \cdot 10^4 \text{ М}$	W
$(N+1)$	0.042
$(N+1) \cdot 2$	0.112
$(N+1) \cdot 3$	0.182
$(N+1) \cdot 4$	0.246
$(N+1) \cdot 5$	0.262

Описать эту зависимость многочленом 2 порядка.

Б) Построить в табличном редакторе Excel (Gnuplot) графические зависимости для экспериментальных данных (точки) и расчетных данных (сплошная линия).

Задание 3.

А) Скорость реакции n -ого порядка описывается следующим уравнением $W = k \cdot C^n$. Экспериментальные данные представлены в таблице:

$C \cdot 10^4 \text{ моль/л}$	W
$(N+1)$	0.042
$(N+1) \cdot 2$	0.112
$(N+1) \cdot 3$	0.182
$(N+1) \cdot 4$	0.246
$(N+1) \cdot 5$	0.262

Определить порядок реакции n и константы скорости k методом выравнивания, рассчитав коэффициенты линейной функции, описывающей эти данные.

Б) Построить в табличном редакторе Excel (Gnuplot) графические зависимости для экспериментальных данных (точки) и расчетных данных (сплошная линия).

Лабораторное занятие 5. Линейный регрессионный анализ с использованием табличных процессоров Calc и Excel

Задание 1. Аппроксимировать экспериментальные данные линейной функцией $y(x) = a_0 + a_1 x$ в случае единичного измерения. Определить значения и погрешности параметров функции.

Лабораторное занятие 6. Линейный регрессионный анализ с использованием программы MNK

Задание 1. Экспериментально были измерены значения константы скорости реакции при разных температурах. Аппроксимировать данные уравнением Аррениуса $k = k_0 \cdot e^{-E_a / RT}$. Найти значения предэкспоненты и энергии активации, определить их погрешности.

Задание 1 выполнить двумя способами:

- использовать средства программы MNK для определения энергии активации;
- привести к линейному виду и провести аппроксимацию линейной функцией.

Примечание: пункт а) является обязательным, пункт б) – дополнительным (на оценку отлично).

Лабораторное занятие 7. Нелинейный регрессионный анализ с использованием табличных процессоров Calc и Excel

Задание 1. Провести аппроксимацию экспериментальных данных (табл.) полиномом 2-й степени. Построить график, где экспериментальные данные отразить символами (без линий), а расчетные значения – линией (без символов).

Задание 2.

Привести к линейному виду уравнение Аррениуса $k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$.

где E_a – энергия активации, k_0 – предэкспоненциальный множитель, R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура. Методом наименьших квадратов найти значения параметров линейной зависимости, рассчитать коэффициент корреляции Пирсона для линейной зависимости. Затем рассчитать значения предэкспоненциального множителя и

энергии активации. Добавить на график расчетную зависимость $k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$.

Задание 3.

Рассчитать дисперсию адекватности для двух случаев: для аппроксимации полиномом и для аппроксимации уравнением Аррениуса.

Задание 4.

Повести экстраполяцию полиномом Аррениуса, выйдя за пределы изменений аргумента.

По результатам заданий 3 и 4 сделать вывод о предпочтительности одной из двух проведенных аппроксимаций.

Лабораторное занятие 8.

Провести аппроксимацию экспериментальных данных полиномом и уравнением Аррениуса, используя программу нелинейного регрессионного анализа NL3.xls.

Критерии оценки (в баллах):

2,5 балла: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент точно ответил на контрольные вопросы, свободно ориентируется в предложенном решении, может его модифицировать при изменении условия задачи. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

2 балла: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент ответил на теоретические вопросы, испытывая небольшие затруднения. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям.

1,5 балла (удовлетворительно): Студент правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе. Студент не может полностью объяснить полученные результаты.

1 балл: Студент неправильно выполнил от 70% до 50% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

0,5 балла: Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

0 баллов Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученные результаты

Вопросы для аудиторной и домашней работы

Занятие № 1

Введение. Предмет дисциплины. Роль математических методов и моделей в познании и научном объяснении явлений и процессов реального физического мира. Закон, закономерность и модель в современной науке.

Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике. Практическое значение и эффективность использования ЭВМ при решении прикладных тематических задач. Связь предмета со специальными дисциплинами.

Понятие модели. Общенаучные основы моделирования. Структуризация. Разновидности модели. Планирование эксперимента. Численные методы. Алгебраические модели. Имитационные модели.

Общая характеристика процессов моделирования. Обоснование структуры, входов и выходов модели. Оценка качества модели. Математическое моделирование и использование ЭВМ.

Занятие № 2

Эксперимент, пространство выборки и результат. Статистика и вероятность. Повторение испытаний.

Закон больших чисел. Центральная предельная теорема. Сбор и анализ данных. Сжатие данных.

Функция плотности и функция распределения. Многомерные распределения.

Кривые распределения и их виды. Меры расположения и рассеяния.

Моменты и семиинварианты. Характеристические функции.

Стандартные распределения (биномиальное, пуассоновское, логарифмическое, гипергеометрическое, нормальное, семейство распределений Пирсона, ряды Грамма-Шарлье, распределение Коши). Другие распределения, связанные с нормальным (Стьюдента, Фишера).

Многомерное нормальное распределение. Пакеты статистических программ для обработки данных.

Занятие № 3

Теоретическая модель и ее согласованность с данными опыта. Критерии значимости. Доверительный интервал.

Описание, анализ и предсказание в статистической теории. Критерии согласия. Классификация оценок. Методы нахождения оценок параметров распределения. Метод максимума правдоподобия.

Занятие № 4

Основы теории общей линейной модели. Однофакторный дисперсионный анализ. Многофакторный дисперсионный анализ. Адекватность модели.

Статистические выводы: критерии значимости, критерии согласия.

Занятие № 5

Простая линейная регрессия и корреляционный анализ. Множественная линейная регрессия, множественная и частная корреляция. Ранг случайной величины. Показатель корреляции рангов.

Множественная корреляция. Корреляционная матрица. Вычисление значений зависимого признака на основе регрессии.

Метод наименьших квадратов. Уравнения параболического вида. Логарифмические и степенные функции.

Другие уравнения применяемые в моделях. Общие принципы выбора уравнения регрессии. Прикладные программы корреляционного и регрессионного анализов.

Критерии оценки (в баллах) аудиторной и домашней работы

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;

- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Коллоквиум № 1.

Введение. Предмет дисциплины. Роль математических методов и моделей, реализованных на персональных компьютерах, в познании и научном объяснении явлений и процессов реального физического мира. Закон, закономерность и модель в современной науке.

Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике. Практическое значение и эффективность использования ЭВМ при решении прикладных математических задач. Связь предмета со специальными дисциплинами.

Понятие модели. Общенаучные основы моделирования. Структуризация. Разновидности модели. Планирование эксперимента. Численные методы. Алгебраические модели. Имитационные модели.

Общая характеристика процессов моделирования. Обоснование структуры, входов и выходов модели. Оценка качества модели. Математическое моделирование и использование ЭВМ.

Эксперимент, пространство выборки и результат. Статистика и вероятность. Повторение испытаний.

Закон больших чисел. Центральная предельная теорема. Сбор и анализ данных. Сжатие данных.

Функция плотности и функция распределения. Многомерные распределения.

Кривые распределения и их виды. Меры расположения и рассеяния.

Моменты и семиинварианты. Характеристические функции.

Стандартные распределения (биномиальное, пуассоновское, логарифмическое, гипергеометрическое, нормальное, семейство распределений Пирсона, ряды Грамма-Шарлье, распределение Коши). Другие распределения, связанные с нормальным (Стьюдента, Фишера).

Многомерное нормальное распределение. Пакеты статистических программ для обработки данных.

Коллоквиум № 2.

Теоретическая модель и ее согласованность с данными опыта. Критерии значимости. Доверительный интервал.

Описание, анализ и предсказание в статистической теории. Критерии согласия. Классификация оценок. Методы нахождения оценок параметров распределения. Метод максимума правдоподобия.

Основы теории общей линейной модели. Однофакторный дисперсионный анализ. Многофакторный дисперсионный анализ. Адекватность модели.

Статистические выводы: критерии значимости, критерии согласия.

Простая линейная регрессия и корреляционный анализ. Множественная линейная регрессия, множественная и частная корреляция. Ранг случайной величины. Показатель корреляции рангов.

Множественная корреляция. Корреляционная матрица. Вычисление значений зависимого признака на основе регрессии.

Метод наименьших квадратов. Уравнения параболического вида. Логарифмические и степенные функции.

Другие уравнения применяемые в моделях. Общие принципы выбора уравнения регрессии. Прикладные программы корреляционного и регрессионного анализов.

Критерии оценки (в баллах):

- 10 баллов выставляется студенту, если студент правильно определяет все элементы симметрии для пяти указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии;
- 8-9 баллов выставляется студенту, если студент правильно 1) определяет все элементы симметрии для четырех указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает мелкие ошибки при установлении группы симметрии, но элементы симметрии определяет безошибочно.
- 6-7 баллов выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для трех указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительны ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 20% молекул;
- 4-5 балла выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для двух указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительны ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 50% молекул;
- 1-3 балла выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для двух указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительны ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 80% молекул;
- 0 баллов выставляется студенту, если . студент не способен определить элементы симметрии хотя бы для одной молекулы и соответственно не способен установить группу симметрии.

Комплект разноуровневых задач (заданий)**1 Задачи репродуктивного уровня**

Привести к линейному виду зависимость концентрации вещества от времени

$$[M](t) = [M]_0 \cdot e^{-kt}$$

2 Задачи реконструктивного уровня

Методом наименьших квадратов определить параметры линейной зависимости и рассчитать начальную концентрацию и константу скорости реакции. Значения привести в системе СИ.

3 Задачи творческого уровня

Выбрать метод определения параметров зависимости $[M](t) = [M]_0 \cdot e^{-kt}$

Применить этот метод, рассчитать коэффициент корреляции.

Варианты:

t, min	M, моль/л
30 + 2*N	1,526
40 + 2*N	1,341
50 + 2*N	1,195
60 + 2*N	0,962
70 + 2*N	0,871

где – N – номер варианта.

Критерии оценки (в баллах):

Описание оцениваемых параметров решения задачи для	Оцениваемые параметры ответа

оценивания практических навыков <i>Балл</i>	
5	Задание решено верно по всем требующим ответа вопросам. Ответ обучающегося полный и правильный. Обучающийся способен изложить решение задания, сделать собственные выводы, проанализировать основные показатели.
4	Задание решено верно. Имеются незначительные недочеты в определении единиц измерения, ставок и пр. Ответ обучающегося в целом полный и правильный. Обучающийся способен изложить решение задания, сделать собственные выводы, проанализировать основные показатели.
3	Задание решено верно, но имеются значительные недочеты в его решении, связанные с неполнотой ответа, с правильным исчислением одних данных и неверным – других и пр. Ответ неполный. Обучающийся не способен четко изложить решение задания, сделать собственные выводы, проанализировать основные показатели. Неверно подсчитан итог, но методика решения задания верная.
2	Задание решено неверно. Ответ неполный. Обучающийся не способен четко изложить методику решения задачи, сделать собственные выводы, проанализировать основные показатели.
1	Обучающийся не решил задание, но приводит определенные рассуждения по его решению.
0	Обучающийся не решил задание или отказался от его выполнения.

Контрольная работа по дисциплине

Вариант 1.

1. Рассчитайте абсолютную погрешность, если точное значение параметра $a=20,25$ и его приближенное значение $a_p=20$.
2. Оцените относительную погрешность величины если точное значение параметра $c=18,25$ и его приближенное значение $c_p=18$.
3. Оценить предельную абсолютную погрешность приближенного значения $a_p=2,72$ числа e , если известно, что $e=2,718281828\ 459045$.

Вариант 2.

1. Рассчитайте абсолютную погрешность, если точное значение параметра $n=10,25$ и его приближенное значение $n_p=10$.
2. Оцените относительную погрешность величины если точное значение параметра $b=28,5$ и его приближенное значение $b_p=28$.
3. Оценить предельную абсолютную погрешность приближенного значения $a_p=4,5$ числа e , если известно, что $e=2,718281828\ 459045$.

Критерии оценки (в баллах):

«зачтено» выставляется студенту, если работа удовлетворяет одному из двух условий:

- 1) работа выполнена правильно как минимум на 50% и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;

- 2) работа выполнена в полном объеме и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой; присутствуют отдельные незначительные ошибки.

«Не зачтено» выставляется студенту в следующих случаях:

- 1) работа правильно выполнена менее, чем на 50%,
- 2) не показано общее понимание вопроса, имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, при знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность основных умений и навыков
- 3) Студент вообще не приступал к выполнению работы.

Комплект тестов (тестовых заданий)

1. Коэффициент Фишера необходим для

- A) установления адекватности модели
- B) установления целесообразности модели
- C) расчета погрешностей

2. Коэффициент Кохрена необходим для

- A) установления адекватности модели
- B) установления целесообразности модели
- C) расчета погрешностей

3. Коэффициент Стьюдента необходим для

- A) установления адекватности модели
- B) установления целесообразности модели
- C) расчета погрешностей

4. Дисперсия адекватности вычисляется по формуле

A)
$$\frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{эксн.}} - y_i^{\text{теор.}})^2}{N - k}$$

B)
$$\frac{\sum_{n=1}^m (y_{in} - \bar{y}_i)^2}{N - k}$$

C)
$$\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N - 1}$$

5. Дисперсия воспроизводимости вычисляется по формуле

A)
$$\frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{эксн.}} - y_i^{\text{теор.}})^2}{N - k}$$

B)
$$\frac{\sum_{n=1}^m (y_{in} - \bar{y}_i)^2}{N - k}$$

$$C) \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1} \quad D)$$

6. Дисперсия относительно среднего вычисляется по формуле

$$A) \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{эксн.}} - y_i^{\text{теор.}})^2}{N-k}$$

$$B) \frac{\sum_{n=1}^m (y_{in} - \bar{y}_i)^2}{N-k}$$

$$C) \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}$$

7. Чем больше доверительная вероятность, тем

- A) меньше коэффициент Стьюдента
- B) больше коэффициент Стьюдента
- C) коэффициент Стьюдента от доверительной вероятности не зависит

8. Чем больше количество измерений, тем

- A) меньше коэффициент Стьюдента
- B) больше коэффициент Стьюдента
- C) коэффициент Стьюдента от количества измерений не зависит

9. Интерполяция это

- A) нахождение такой функции, которая была бы близка заданной.
- B) способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений
- C) логико-методологическая процедура распространения (переноса) выводов, сделанных относительно какой-либо части объектов или явлений на всю совокупность
- D) статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин

10. Аппроксимация это

- A) нахождение такой функции, которая была бы близка заданной.
- B) способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений
- C) логико-методологическая процедура распространения (переноса) выводов, сделанных относительно какой-либо части объектов или явлений на всю совокупность
- D) статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин

11. Экстраполяция это

- A) нахождение такой функции, которая была бы близка заданной.
- B) способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений
- C) логико-методологическая процедура распространения (переноса) выводов, сделанных относительно какой-либо части объектов или явлений на всю совокупность
- D) статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин

12. Корреляция это

- A) нахождение такой функции, которая была бы близка заданной.
- B) способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений
- C) логико-методологическая процедура распространения (переноса) выводов,

сделанных относительно какой-либо части объектов или явлений на всю совокупность

D) статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин

13. Стандартное отклонение вычисляется по формуле

- A) $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$
- B) $\left| \frac{df(x)}{dx} \right| \Delta x$
- C) $\frac{t_\alpha \cdot {}^n S}{\sqrt{n}}$
- D) $\left| \frac{d(\ln f(x))}{dx} \right| \Delta x$

14. Абсолютная погрешность измерений вычисляется по формуле

- A) $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$
- B) $\left| \frac{df(x)}{dx} \right| \Delta x$
- C) $\frac{t_\alpha \cdot {}^n S}{\sqrt{n}}$
- D) $\left| \frac{d(\ln f(x))}{dx} \right| \Delta x$

15. Абсолютная погрешность косвенных измерений вычисляется по формуле

- A) $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$
- B) $\left| \frac{df(x)}{dx} \right| \Delta x$
- C) $\frac{t_\alpha \cdot {}^n S}{\sqrt{n}}$
- D) $\left| \frac{d(\ln f(x))}{dx} \right| \Delta x$

16. Относительная погрешность косвенных измерений вычисляется по формуле

- A) $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$
- B) $\left| \frac{df(x)}{dx} \right| \Delta x$
- C) $\frac{t_\alpha \cdot {}^n S}{\sqrt{n}}$
- D) $\left| \frac{d(\ln f(x))}{dx} \right| \Delta x$

17. Систематическая погрешность

- A) вызывается факторами, действующими одинаково при многократном повторении одних и тех же измерений
- B) это погрешность, существенно превышающая ожидаемую в данных условиях
- C) возникает вследствие ряда причин, действие которых в каждом опыте неодинаково и не может быть учтено
- D) это погрешность измерительных приборов

18. Промахи

- A) вызывается факторами, действующими одинаково при многократном повторении одних и тех же измерений
- B) это погрешность, существенно превышающая ожидаемую в данных условиях
- C) возникает вследствие ряда причин, действие которых в каждом опыте неодинаково и не может быть учтено
- D) это погрешность измерительных приборов

19. Случайная погрешность

- A) вызывается факторами, действующими одинаково при многократном повторении одних и тех же измерений
- B) это погрешность, существенно превышающая ожидаемую в данных условиях
- C) возникает вследствие ряда причин, действие которых в каждом опыте неодинаково и не может быть учтено
- D) это погрешность измерительных приборов

20. Случайная погрешность

- A) уменьшается при увеличении числа опытов
- B) увеличивается при увеличении числа опытов
- C) не зависит от числа опытов
- D) нет правильного ответа

21. Систематическая погрешность

- A) уменьшается при увеличении числа опытов
- B) увеличивается при увеличении числа опытов
- C) не зависит от числа опытов
- D) нет правильного ответа

22. Грубая погрешность

- A) уменьшается при увеличении числа опытов
- B) увеличивается при увеличении числа опытов
- C) не зависит от числа опытов
- D) нет правильного ответа

23. Линия тренда проводится

- A) по методу наименьших квадратов
- B) при помощи сплайнов
- C) как можно ближе к экспериментальным точкам
- D) через экспериментальные точки

24. Коэффициент корреляции Пирсона вычисляется по формуле

- A)
$$\frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}$$
- B)
$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$
- C)
$$\frac{t_\alpha \cdot \sqrt{n} \cdot S}{\sqrt{n}}$$

$$D) \left| \frac{d(\ln f(x))}{dx} \right| \Delta x$$

25. Нет смысла увеличивать число измерений, когда

- А) случайная погрешность станет меньше систематической
- В) случайная погрешность станет больше систематической
- С) случайная погрешность станет равна систематической

- 1 балл выставляется студенту за каждый ответ, если ответ правильный;
- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный;

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Теория вероятностей и математическая статистика. Учебное пособие. / Яковлев В. П. / 2-е изд. - М.: Дашков и Ко, 2011. - 182 с. / Электронный читальный зал БГУ
2. Введение в математическое моделирование. Учебное пособие. / Под редакцией: Трусов П. В. М.: Логос, 2004. - 439 с. / Электронный читальный зал БГУ
3. Численные методы. / Формалев В. Ф. , Ревизников Д. Л. / М.: Физматлит, 2006. - 400 с. / Электронный читальный зал БГУ

Дополнительная литература:

4. Аффифи, А. Статистический анализ: подход с использованием ЭВМ / А. Аффифи, С. Эйзен. – М.: Мир, 1982. – 488 с.
5. Акулич, И.Л. Математическое программирование в примерах и задачах / И.Л. Акулич. – М.: Высшая школа, 1986. – 319 с.
6. Прицкер, А. Введение в имитационное моделирование / А. Прицкер. – М.: Мир, 1987. – 644 с.
7. Розен, В.В. Математические модели принятия решений в экономике / В.В. Розен. – М.: Высшая школа, 2002. – 288 с.
8. Рыжиков, Ю.И. Имитационное моделирование / Ю.И. Рыжков. – СПб.: КОРОНА принт; М.: Альтекс-А, 2004. – 384 с.
9. Бегун, П.И. Моделирование в биомеханике / П.И. Бегун, П.Н. Афонин. – М.: Высшая школа, 2004. – 390 с.
10. Орехов, Н.А. Математические методы и модели в экономике / Н.А. Орехов, А.Г. Левин, Е.А. Горбунов. – М.: Юнити - ДАНА, 2004. – 302 с.
11. Самарский, А.А. Математическое моделирование / А.А. Самарский. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>2. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p>3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310</p>	<p style="text-align: center;">Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MD i5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 1</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License</p>

<p>(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p>	<p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76. Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50. Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27. Читальный зал № 6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30. Читальный зал № 7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p>	
<p>4. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p>	<p>Лаборатория № 418 Учебная мебель, факсимильный аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5кВТ; 2А,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперметрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung BX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolopino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Вепс1.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p>	
<p>5. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 416 (химфак корпус).</p>	<p>Лаборатория № 416 Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifebook F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Wi n7НВ+0ffice, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"СQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины ПЕРСОНАЛЬНЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ В ХИМИИ

на 3 семестр

очная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	6/216
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	90
лекций	36
практических/ семинарских	-
лабораторных	54
контроль самостоятельной работы (КСР)	-
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС) включая подготовку к экзамену/зачету	125,8

Форма(ы) контроля:
зачет 3 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)					Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		Всего	ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Введение. Классификация моделей и методов решения задач	26	6	-	12	18	[1-4, 6, 11]	1-10 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
2.	Статистический анализ: теория распределений	26	6	-	12	20	[1,3,4]		Проверка домашней и аудиторной работы
3.	Статистические выводы: критерии значимости, критерии согласия	20	6	-	8	14	[1,2,7]	11-20 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
4.	Дисперсионный анализ	18	4	-	6	18	[5,8]	21-35 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
5	Регрессионный и корреляционный анализы .	18	4	-	8	16	[1,9,10]	40-55 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
6	Методы многомерного статистического анализа	8	4	-	-	15,3	[1,2,6]	56-70 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
7	Статистический анализ временных рядов	28	6		8	24	[3,4]		Проверка домашней и аудиторной работы
	Всего часов:	144	36		54	125,3			

Б1.В.ДВ.02.02 Персональные компьютеры в химии
направление/специальность 04.03.01. Химия
курс 2, семестр 3

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Выполнение лабораторных работ	2,5	4	0	10,00
2. Решение типовых задач	5,00	2	0	10,00
3. Устный опрос на лабораторном занятии	5,00	1	0	5,00
Рубежный контроль				
1. Коллоквиум № 1 (по практике)	10,00	1	0	10,00
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Решение типовых задач	1,00	5	0	5,00
2. Выполнение лабораторных работ	2,50	4	0	10,00
3. Устный опрос	5,00	1	0	5,00
Рубежный контроль				
1. Коллоквиум по всем темам дисциплины	10,00	1	0	10,00
2. Тест	30	1	0	30,00
Посещаемость				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6,00
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10,00
Поощрительные баллы				
Участие в олимпиадах	1,00		0	1,00
Участие в конференциях	2,00		0	2,00
Публикация тезисов	3,00		0	3,00
Публикация статей	4,00		0	4,00
			Итого	10
Итоговый контроль				
Зачет			60	100
Контрольная работа			Не зачтено	Зачтено