

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Проректор



Программа дисциплины

Б1.В.ОД.5 «ЭВМ в химических расчетах»

Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки

Профиль подготовки

02.00.13 Нефтехимия

Квалификация выпускника «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения: очная

Язык обучения: русский

Казань 2015

1. КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ

Данная дисциплина связана с предшествующими курсами физической химии, квантовой химии, строения вещества, информатики. Обучающийся должен знать основы химической термодинамики, квантовой химии и строения вещества. Обучающийся также должен иметь навыки практической работы с ЭВМ, желательно знание пакета Mathcad.

В ходе изучения данной дисциплины обучающиеся должны получить представление о моделировании равновесий в сложных многокомпонентных системах, о построении модели состояния комплексной частицы в растворе. Освоение данного курса необходимо для выполнения квалификационных работ в области неорганической химии и химии растворов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «ЭВМ в химических расчётах» относится к обязательным дисциплинам раздела «Вариативная часть» (Б1.В.ОД) послевузовского профессионального образования.

Осваивается на 2 курсе (4 семестр).

Для успешного освоения данной дисциплины нужно освоение в качестве предшествующих следующих дисциплин: «Неорганическая химия» (ионные равновесия в растворе, химия комплексных соединений), «Аналитическая химия» (статистические методы анализа), «Физическая химия» (термодинамика и кинетика).

3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ЭВМ в химических расчётах»

Обучающийся, завершивший изучение дисциплины, должен

знать: общие закономерности протекания химических реакций в растворах и твердой фазе, основы химической термодинамики и кинетики.

уметь: представлять для расчета равновесные данные физико-химических методов, создавать компьютерные молекулярные модели.

владеть: теоретическими знаниями о химическом эксперименте и возможностях статистических представлений при качественном и количественном описании сложных химических систем.

демонстрировать способность и готовность: применять результаты освоения дисциплины в профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
УК-4	готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-2	готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук
ПК-9	владение теоретическими основами, связанными с химизмом, термодинамикой и кинетикой современных процессов нефте- и газопереработки, а также особенностями классических реакций и моделированием технологических процессов

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

4.1. Распределение трудоёмкости дисциплины (в часах) по видам нагрузки обучающегося и по разделам дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часов.

Форма промежуточной аттестации по дисциплине: зачет в 4 семестре.

	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1.	Тема: Становление концепции, этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований	4	2	0	0	
2.	Тема: Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	4	2	0	0	9
3.	Тема: Модельный объект и его неизвестные состояния.	4	2	0	0	9
4.	Тема: Прямые и обратные задачи химического равновесия.	4	1,5	2		9
5.	Тема: Количественные обратные задачи.	4	1,5	2	0	9
6.	Тема: Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия.	4	1,5	0	0	9
7.	Тема: Знакомство с математической программой Mathcad 2012.	4	1,5	2	0	9
	Всего:		12	6	0	54

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1.

Становление концепции, этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований.

Тема 2.

Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях. Формы учета материального баланса и условий равновесия.

Тема 3.

Модельный объект и его неизвестные состояния. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей расхождения экспериментального и теоретических полей.

Тема 4.

Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка.

Тема 5.

Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала. Модели прямых измерений. Модели косвенных измерений с линейной зависимостью модельного поля от неизвестных параметров. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.

Тема 6.

Некоторые типовые оценочные процедуры. Оценивание с использованием готовых теоретических решений. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема. Замечания относительно оптимальных методов оценивания.

Тема 7.

Знакомство с математической программой Mathcad 2012.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На лекциях:

- интерактивные лекции.

На семинарах:

- ответы на вопросы и устные сообщения на заданную тему.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Вопросы к практическим занятиям

Тема 1.

1. Метод последовательного сужения области поиска
2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты
3. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей

Тема 2

4. Метод максимального правдоподобия
5. Теоретическое модельное поле
6. Расхождение экспериментального и теоретического полей

Тема 3.

7. Экспериментальное поле измерений
8. Неоднозначность решения обратных задач
9. Математическая трактовка прямых и обратных задач

Тема 4.

10. Законы распределения вероятностей экспериментального и теоретического полей. Матрица ковариаций
11. Модели прямых измерений. Модель косвенных измерений с линейной зависимостью.

12. Модельный объект и его неизвестные состояния

Тема 5.

- 13. Общая модель измерений
- 14. Физическая трактовка обратных задач

Тема 6

- 15. Оценивание с использованием готовых теоретических полей.
- 16. Функции достаточного приема.

Тема 7.

- 17. Итерационная процедура Ньютона-Лекама
- 18. Градиентный перебор неизвестных параметров

Вопросы к самостоятельной работе

Тема 1.

Работы Силлена Л.Г. по математической трактовке образования полиядерных комплексов

Тема 2.

Сравнение описания равновесной системы с помощью последовательных и общих констант равновесий.

Тема 3.

Примеры построения модельных объектов на основе данных методов рН-метрии и протонной магнитной релаксации.

Тема 4.

Ознакомление с работой основных блоков программы CPESP.

Тема 5

С помощью программы CPESP провести расчет равновесного состава для модельной системы.

Тема 6.

С помощью программы CPESP провести несколько вариантов решения обратной задачи для модельной системы, предполагая образование как моно-, так и полиядерных комплексов.

Тема 7.

Выбрать наиболее оптимальные варианты связности для модельной молекулы и выявить наиболее вероятные конформации.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

7.1. Регламент дисциплины

Лекции	12 часов
Отчетности (официальные)	Зачет
Количество баллов, выделенных на курс	100

Таблица 2 Распределение баллов по видам занятий

Тест-задания	5
Опрос на лекциях	5
Контрольная работа	25
Реферат	15
Зачет	50

7.2. Оценочные средства текущего контроля

Тестирование по темам 1-7.

Примеры тестовых заданий:

1. Функция образования - это:

А – среднее число лигандов, связанных с одним ионом металла

Б – среднее число молекул воды, связанных с ионом металла

В – среднее число ионов металла, связанных с лигандом

(ответ: А)

1. Условие минимума энергии Гиббса:

А $\Delta G = \min(\sum n_i(\mu_i^0 + RT \ln N_i))$

Б $\Delta G = \min(\sum n_i(S_i^0 + RT \ln N_i))$

В $\Delta G = \min(\sum n_i(\Delta H_i^0 - T \Delta S_i^0 + RT \ln N_i))$

(ответ: А)

3. Поле наблюдений – это:

А электромагнитное поле

Б электрическое поле

В совокупность экспериментальных данных.

(ответ: В)

4. Модельный объект – это:

А. Раствор, содержащий предполагаемые комплексные частицы

Б. Шаростержневая модель комплексной частицы.

В. Идеализированная совокупность полей наблюдений

(ответ: В)

5. Метод молекулярной механики использует математическую аппроксимацию поверхности:

А. Ньютона-Рафсона

Б. Борна-Оппенгеймера

В. Римана –Лобачевского

(ответ: Б)

6. Энергия деформации связей и валентных углов определяется потенциалом в форме закона:

А. Бэра

Б. Гука

В. Кирхгофа

(ответ: Б)

7. Взаимодействие валентно-несвязанных атомов описывается потенциалом:

- А. Букингама
 - Б. Вектор-потенциалом магнитного поля
 - В. Леннард – Джонса.
 - Г. Гравитационным потенциалом
- (ответ: А, В)

8. Распределение мольных долей конформеров определяется:
- А. Разницей абсолютных энтропий
 - Б. Разницей энтальпий образования
 - В. Разницей свободных энергий
- (ответ: В)

9. Наиболее выгодная геометрия комплекса ML_8 может быть представлена следующим полиэдром:
- А. Двухшапочная тригональная призма.
 - Б. Куб
 - В. Додекаэдр
 - Г. Квадратная антипризма
- (ответ: Г)

10. Наиболее выгодная геометрия комплекса ML_9 может быть представлена следующим полиэдром:
- А. Трехшапочная тригональная призма.
 - Б. Одношапочный куб
 - В. Одношапочный додекаэдр
 - Г. Одношапочная квадратная антипризма
- (ответ: А)

Темы рефератов

1. Методы поиска экстремума.
2. Количественное описание сложных равновесных систем
3. Метод Бринкли
4. Силовые поля молекулярной механики.

Письменное домашнее задание

1. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESPP провести моделирование равновесий в системе железо(III) – лимонная кислота.
2. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESPP провести моделирование равновесий в системе диспрозий(III) – лимонная кислота
3. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESPP провести моделирование равновесий в системе диспрозий(III) - d-винная кислота.
4. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESPP провести моделирование равновесий в системе железо(III) – молочная кислота
5. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESPP провести моделирование равновесий в системе тербий(III) – d-винная кислота
6. С помощью программного пакета HYPERCHEM найти наиболее выгодные конформации монотартрата диспрозия
7. С помощью программного пакета CHEM DRAW найти наиболее выгодные конформации ксилотриоксиглутаровой кислоты.

7.3. Вопросы к зачету

Билет 1

1. Метод последовательного сужения области поиска.
2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты.

Билет 2

1. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей.
2. Метод максимального правдоподобия

Билет 3

1. Метод молекулярной механики
2. Моделирование гидратной сферы комплекса на примере монотартрата диспрозия

7.4. Таблица соответствия компетенций, критериев оценки их освоения и оценочных средств

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции	Показатель формирования компетенции для данной дисциплины	Оценочное средство
УК-4	готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	Приобретение готовности использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 1-4)
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Приобретение способности самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия
ОПК-2	готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	Аспирант готов организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук, в том числе с применением современных программных пакетов	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 4-7)
ПК-9	владение теоретическими основами, связанными с химизмом, термодинамикой и	Аспирант демонстрирует владение теоретическими основами, связанными с	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия

	кинетику современных процессов нефте- и газопереработки, а также особенностями классических реакций и моделированием технологических процессов	химизмом, термодинамикой и кинетикой современных процессов нефте- и газопереработки, а также особенностями классических реакций и моделированием технологических процессов, в том числе с применением современных программных пакетов	
--	--	---	--

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОСВОЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Работу по дисциплине следует начать с предварительной проработки литературы. Предварительно надо изучить руководства по работе в программных пакетах CRESSP, HYPERCHEM, CHEM DRAW. Также весьма желательно проработать материалы, касающиеся вопросов комплексообразования в растворах (литература дается лектором).

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Основная литература

1. Прикладные информационные технологии: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, Е.М. Портнов. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=392462>
2. Базовые и прикладные информационные технологии: Учебник / В.А. Гвоздева. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 384 с. URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=428860>
3. Информационные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, А.А. Федотов. - М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2011. - 336 с. URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=251095>
4. Статистические методы обработки экспериментальных данных с использованием пакета MathCad: Учебное пособие/Ф.И.Карманов, В.А.Острейковский - М.: КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 208 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508241>

9.2. Дополнительная литература

1. Очков, В. Ф. Mathcad 14 для студентов и инженеров: русская версия [Электронный ресурс] / В.Ф. Очков. — СПб.: БХВ-Петербург, 2009. — 494 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=489387>
2. Информационные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, А.А. Федотов. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с. URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=411182>
3. Гафурова, Н. В. Методика обучения информационным технологиям. Практиум [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Н. В. Гафурова, Е. Ю. Чурилова. - Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2011. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=441409>
4. Моделирование систем и процессов: Учебное пособие / Н.Г. Чикуров. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 398 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=392652>

5. Дьяконов, В. П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство [Электронный ресурс] / В. П. Дьяконов. - М.: ДМК Пресс, 2010. - 624 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=408353>
6. Численные методы и программирование: Учебное пособие / В.Д. Колдаев; Под ред. Л.Г. Гагариной. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 336 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=452274>
7. Афонский, А. А. Электронные измерения в нанотехнологиях и микроэлектронике [Электронный ресурс] / А. А. Афонский; В. П. Дьяконов; под ред. проф. В. П. Дьяконова. - М.: ДМК Пресс, 2011. - 688 с. URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=406873>

9.3. Интернет-ресурсы:

<http://www.krelib.com/matematika/1466>
<http://icchair.niic.nsc.ru/lectures/2.shtml>
http://krelib.com/obshaja_fizika/33781
<http://arhivknig.com/obrazovanie/56490-fiziko-khimicheskie-raschety-na-mikro-jevm..html>
http://krelib.com/fizicheskaja_himija_himicheskaja_fizika/14364
http://elibrary.ru/title_about.asp?id=18537
http://elibrary.ru/title_about.asp?id=33274
<http://dasher.wustl.edu/tinker/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. Мультимедийный проектор и ноутбук.
2. Компьютерный класс.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Знаниум", доступ к которой предоставлен обучающимся. Электронно-библиотечная система "Знаниум" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. Знаниум обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВО.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (Приказ Минобрнауки РФ от 30.07.2014 № 869) и с учетом рекомендаций по направлению подготовки.

Автор(ы): профессор Сальников Ю.И.



профессор Чевела В.В.



Рецензент: профессор Девятов Ф.В.



Программа одобрена на заседании учебно-методической комиссии Химического института протокол № 7 от 31 августа 2015 г.