

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Вычислительные методы в химии

Уровень высшего образования

Специалитет

Направление подготовки / специальность

04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы

Неорганическая химия

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.02.07 Вычислительные методы в химии относится к обязательной части образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
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-3-1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3-2: Применяет современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения при решении задач химической направленности	ОПК-3-1: Знать о главных задачах и объектах исследования математической химии как науки, ее междисциплинарных связях; о составе, математическом формализме и алгоритмах основных методов математической химии. Уметь находить математический метод для решения химических задач; формулировать алгоритмы решения основных задач математической химии вычислительными методами; описывать ход решения и алгоритмы основных методов и приемов математической химии, таких как методы корреляционного анализа, методы решения систем линейных алгебраических уравнений, вычисление определителей, решение задачи на собственные значения и собственные вектора матриц, решение алгебраических уравнений при помощи метода Гаусса и методами корреляции, решение дифференциальных уравнений методами Эйлера и Рунге-Кутты, решение систем дифференциальных	Задания Сообщение на семинарских занятиях	Экзамен: Контрольные вопросы

		<p>уравнений, вычисление определенных интегралов; описывать основные алгоритмы математических методов в химии и химической технологии; планировать проведение исследований математическими методами при решении задач химии и химической технологии. Знать о главных задачах и объектах исследования математической химии как науки, ее междисциплинарных связях; о составе, математическом формализме и алгоритмах основных методов математической химии.</p> <p>Уметь находить математический метод для решения химических задач; формулировать алгоритмы решения основных задач математической химии вычислительными методами; описывать ход решения и алгоритмы основных методов и приемов математической химии, таких как методы корреляционного анализа, методы решения систем линейных алгебраических уравнений, вычисление определителей, решение задачи на собственные значения и собственные вектора матриц, решение алгебраических уравнений при помощи метода Гаусса и методами корреляции, решение дифференциальных уравнений методами Эйлера и Рунге-Кутты, решение систем дифференциальных уравнений, вычисление определенных интегралов; описывать основные алгоритмы математических методов в химии и химической технологии; планировать проведение исследований математическими методами при решении задач химии и</p>		
--	--	--	--	--

		<p>химической технологии.</p> <p>Владеть навыками построения математических моделей химических процессов; выбора математических методов и алгоритмов математических моделей химических процессов, в основе которых лежит корреляционный анализ, решение систем линейных алгебраических уравнений, решение алгебраических уравнений, решение дифференциальных уравнений, решение систем дифференциальных уравнений, вычисление интегралов, методы оптимизации, в том числе поиск минимумов, максимумов и седловых точек на поверхностях потенциальной энергии; методы квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики, методы Монте Карло.</p> <p>ОПК-3-2:</p> <p>Знать о главных задачах и объектах и приемах проведения исследования при помощи современного программного обеспечения, баз знаний и баз данных.</p> <p>Уметь находить современное программное обеспечение, базы данных и базы знаний для решения химических задач; формулировать алгоритмы решения основных задач химии и химической технологии при помощи современного программного обеспечения, баз данных и баз знаний.</p> <p>Владеть навыками построения входной информации для использования современных компьютерных методов расчета свойств химических</p>		
--	--	--	--	--

		<p>веществ и химических реакций с их участием, а также поисковых систем, входной информации для баз данных и баз знаний.</p>		
<p>ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>ОПК-5-1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля</p> <p>ОПК-5-2: Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности</p>	<p>ОПК-5-1:</p> <p>Знать о поиске, хранении и анализе химической информации; об алгоритмах, основных методах применения информационных технологий в химии; о способах визуализации химической информации и о способах оценки ее релевантности; о предмете и основных понятиях хемоинформатики; об основных информационных ресурсах и их доступности; о методе виртуального скрининга в химии и химической фармакологии; о базах данных и базах знаний в химии и химической технологии.</p> <p>Уметь осуществлять поиск химической информации при помощи сетевых технологий; составлять запросы и проводить поиск в сетевых информационных ресурсах; находить оптимальный метод для решения химических задач методом поиска и анализа химической информации при помощи компьютерных технологий; составлять запросы к базам данных и информационным ресурсам в области химии и химической технологии.</p> <p>Владеть навыками работы с информационными ресурсами сетей в области химии и химической технологии; методами оптимизации запроса на поиск химической информации; методами оценки химической информации: ее релевантности, полноты,</p>	<p>Задания</p> <p>Сообщение на семинарских занятиях</p>	<p>Экзамен:</p> <p>Контрольные вопросы</p>

		<p>однозначности; методами визуализации химической информации.</p> <p>ОПК-5-2: Знать о способах эффективной работы с IT-технологиями, способах сохранения химической информации и о приемах безопасной работы с ней.</p> <p>Уметь пользоваться антивирусными средствами контроля и сохранения информации, визуализации результатов поиска и обработки информации.</p> <p>Владеть навыками безопасной работы на компьютере, в том числе с антивирусными программами обработки информации.</p>		
--	--	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	5
Часов по учебному плану	180
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	32
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	78
Промежуточная аттестация	36
	Экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем),	Самостоятельная работа

		часы из них			обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/ лабора- торные работы), часы	Всего	
	О Ф О	О Ф О	О Ф О	О Ф О	О Ф О
Тема 1 Предмет дисциплины «Вычислительные методы в химии»	10	2	2	4	6
Тема 2. Теория корреляционных зависимостей в химии, химической технологии, биологии и медицине	12	2	4	6	6
Тема 3. Методы линейной алгебры в химии и химической технологии	14	4	4	8	6
Тема 4. Методы решения алгебраических уравнений	11	3	4	7	4
Тема 5. Вычисление определенного интеграла	12	4	2	6	6
Тема 6. Решение дифференциальных уравнений	10	2	2	4	6
Тема 7. Решение систем дифференциальных уравнений	8	2	2	4	4
Тема 8. Приближение Борна- Оппенгеймера - методологическая основа изучения свойств атомов и молекул	13	3	2	5	8
Тема 9. Методы поиска минимума и максимума функции нескольких переменных	13	3	2	5	8
Тема 10. Методы построения поверхностей потенциальной энергии	17	3	4	7	10
Тема 11. Основы информационных технологий в химии и химической технологии	22	4	4	8	14
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	180	32	32	66	78

Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1 Предмет дисциплины «Вычислительные методы в химии»

Описан предмет дисциплины "Математические методы в химии" и указывается на его связи с другими разделами химии. Представлены рекомендации по освоению курса. Введено понятие математической модели в химии и понятие изоморфизма. Приведен список учебных пособий и литературы по дисциплине.

Тема 2. Теория корреляционных зависимостей в химии, Дано определение корреляционной зависимости. Рассмотрены методы поиска корреляционных зависимостей при помощи метода наименьших квадратов. Введено понятие коэффициента корреляции. Описано применение коэффициентов корреляции для оценки качества корреляционных зависимостей. Рассмотрено применение корреляционных зависимостей в методах спектрального анализа, для оценки относительной реакционной способности.

Тема 3. Методы линейной алгебры в химии и химической технологии. Обсуждаются основные свойства векторов, матриц, определителей для дальнейшего использования в химии и химической технологии. Задача на собственные значения и собственные вектора операторов. Метод векового уравнения.

Тема 4. Методы решения алгебраических уравнений.

Изложены основы метода Гаусса и методов итерации. Их преимущества и недостатки.

Тема 5. Вычисление определенного интеграла.

Химические задачи, которые приводят к необходимости вычисления определенных интегралов численными методами. Метод прямоугольников, метод трапеций, метод симпсона. Понятие о методах Котеса и квадратур Гаусса.

Тема 6. Решение дифференциальных уравнений.

Химические задачи, которые приводят к необходимости решения дифференциальных уравнений. Задачи формальной кинетики и диффузии. Необходимость корректного задания граничных условий.

Метод Эйлера и методы Рунге-Кутты. Методы последовательных приближений.

Тема 7. Решение систем дифференциальных уравнений. Метод Эйлера и методы Рунге-Кутты.

Начальные и граничные условия для задач формальной химической кинетики. Оценка точности решения дифференциальных уравнений.

Тема 8. Приближение Борна-Оппенгеймера - методологическая основа изучения свойств атомов и молекул. Уравнения Шредингера для электронной и ядерной волновых функций. Понятие о поверхности потенциальной энергии. Применение этих объектов для исследований механизмов химических реакций. Критические точки поверхностей потенциальной энергии и их связь с механизмами химических реакций.

Тема 9. Методы поиска минимума и максимума функции нескольких переменных. Метод наискорейшего спуска, Проблема выбора шага поиска, метод сопряженных градиентов и метод Ньютона-Рафсона.

Тема 10. Методы построения поверхностей потенциальной энергии. Методы квантовой химии, молекулярной механики, молекулярной динамики и метод Монте-Карло. Преимущества и недостатки перечисленных методов.

Тема 11. Основы информационных технологий в химии и химической технологии.

Особенности химической информации. Базы данных, базы знаний и системы искусственного интеллекта.

Методы химического дизайна и химического скрининга.

Способы поиска химической информации в сетях Интернет.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

1. Зеленцов С.В. Математические методы в химии: учебное пособие. Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2016.-102с.

2. Применение программы GAUSSIAN для расчета молекул в возбужденном состоянии: Учебно-методическое пособие/ Составители: Плехович С.Д.б Зеленцов С.В. - Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2023. - 23с.

3. Foresman J.D., Frisch A. Exploring chemistry with electronic structure methods. - 2 edition: U.S.A., 2003. - 301p.

4. Jensen F. Introduction to computer chemistry. - Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2007.-599p

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ОПК-3:

1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.

2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.
3. Укажите на различие подходов математики и компьютерной химии при описании химических явлений.
4. Каким образом с Вашей точки зрения можно получать новое химическое знание при помощи компьютерной химии?
5. Что такое математическая модель химического явления? Дайте определение и назовите свойства.
6. Назовите способы использования математических методов и информационных технологий в химии.
7. Можно ли воспользоваться другими, чем сумма квадратов отклонений расчетного значения от экспериментального, способами выражения степени отклонения теоретической кривой от экспериментальной?
8. Назовите наиболее важные области применения корреляционных зависимостей.
9. Опишите алгоритм поиска наилучшей корреляционной зависимости для наборов экспериментальных данных.
10. Опишите алгоритмы применения метода наименьших квадратов для спектрофотометрического анализа состава сложных смесей.
11. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.
12. Почему при поиске корреляционных зависимостей часто применяют метод наименьших квадратов? Объясните происхождение названия метода.
13. Решить методом исключения Гаусса систему уравнений 4-го порядка

$$\begin{cases} x + 4y + 2z + q = 5 \\ 3x + 5y - 2z + 2q = 7 \\ 4x - 2y + 3z - q = 3 \\ -2x + 3y - 4z + q = -6 \end{cases}$$

14. Разработать алгоритм вычисления определителя n -го порядка методом исключения элементов по Гауссу.
15. Почему метод простой итерации работает, как правило, медленнее, чем метод Зайделя?
16. Системы линейных уравнений, у которых коэффициенты при неизвестных могут различаться на несколько десятичных порядков, решаются, как правило, с трудом. Почему? Что нужно сделать, чтобы это избежать?
17. Опишите суть алгоритма Гаусса для решения системы неоднородных уравнений с числом переменных равном числу уравнений.

18. Что такое «аналитические длины волн» в спектрофотометрическом методе анализа?
19. Как на основании вида разложения спектра поглощения смеси компонентов в виде суммы их гауссовых компонент определить наличие аналитических длин волн?
20. При каких условиях для анализа спектров поглощения сложных смесей можно пользоваться приближением аддитивности вкладов компонентов смеси?
21. Найти формулу для расчета оценочного числа шагов алгоритма в методе деления отрезка пополам для достижения наперед заданной точности.
22. Разработать алгоритм метода деления отрезка пополам для нахождения нескольких (всех) корней уравнения.
23. Можно ли в методе деления отрезка использовать его деление не на 2, а на 3 или 4 отрезка?
24. Опишите метод Ньютона-Рафсона для решения уравнения.
25. Докажите, что метод Ньютона-Рафсона быстрее, чем метод деления отрезка пополам сходится к решению уравнения.
26. Назовите химические задачи, приводящие к необходимости поиска корней уравнения.
27. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Эйлера.
28. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Рунге-Кутты четвертого порядка.
29. При решении дифференциальных уравнений численными методами наиболее точными являются решения для нескольких первых значений аргумента. Почему ?
30. Что такое начальные и граничные условия? Почему их знание важно при решении дифференциальных уравнений, возникающих в химии или физике?
31. Почему математические модели, основанные на использовании дифференциальных уравнений и их систем, получили очень широкое распространение в физике и химии?
32. Почему метод Симпсона точнее метода прямоугольных трапеций ?
- 33.

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ОПК-5:

1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.
2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.
3. Каким образом с Вашей точки зрения можно получать новое химическое знание при помощи компьютерной химии?
4. Назовите способы использования информационных технологий в химии.

5. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.
6. Почему математические модели, основанные на использовании дифференциальных уравнений и их систем, получили очень широкое распространение в физике и химии?
7. Как на основании вида разложения спектра поглощения смеси компонентов в виде суммы их гауссовых компонент определить наличие аналитических длин волн?
8. Что такое поверхность потенциальной энергии для химической реакции и как она применяется в информационных технологиях в химии и химической технологии?
9. Что такое критические точки на ППЭ? Назовите способы их идентификации.
10. Опишите алгоритм использования квантово-химических расчетов и информационных технологий в химических исследованиях.
11. Опишите основные возможности программного комплекса Gaussian 03.
12. Назовите средние величины разностей между рассчитанными и при помощи современной квантовой химии и экспериментальными значениями химических величин.
13. Опишите принципы выбора подходящего базиса для проведения квантово-химических расчетов.
14. Опишите принципы выбора начальных геометрических параметров при проведении квантово-химических расчетов.
15. Опишите особенности поиска информации в поисковой системе GOOGLE.
16. Перечислите принципы правильного выбора ключевых слов для поиска химической информации.
17. Что отличает химическую информацию от других видов информации?
18. Перечислите сайты, наиболее полезные для поиска химической информации.
19. Что такое хеминформатика?
20. Что такое «фармакологическая химия», и как она связана с компьютерной химией?
21. Назовите наиболее известные поисковые системы по химии и укажите их адреса.
22. Назовите наиболее известные электронные химические каталоги и укажите их адреса.
23. Что такое виртуальный скрининг?
24. Как можно использовать принцип "структурный фрагмент молекулы – свойство"?

Критерии оценивания (оценочное средство - Задания)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Задание выполнено полностью, студент выполнил задание и показал знание теоретического материала для его выполнения
не зачтено	Студент не выполнил задание и не знает теоретического материала для его выполнения и способов его использования

5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Сообщение на семинарских занятиях) для оценки сформированности компетенции ОПК-3:

Задача 1. Описать алгоритм решения уравнения методом деления пополам .

Задача 2. Описать алгоритм решения системы линейных неоднородных уравнений методом Гаусса

Задача 3. Описать алгоритм решения дифференциального уравнения методом Эйлера.

Задача 4. Описать алгоритм оптимизации функции нескольких переменных методом наискорейшего спуска.

Задача 5. Описать алгоритм условной оптимизации функции нескольких переменных методом множителей Лагранжа.

Задача 6. Описать алгоритм решения задачи на поиск собственных значений и собственных векторов методом секулярных детерминантов.

Задача 7. Описать алгоритм нахождения определенного интеграла методом Монте-Карло.

5.1.4 Типовые задания (оценочное средство - Сообщение на семинарских занятиях) для оценки сформированности компетенции ОПК-5:

Задача 1. Написать набор ключевых слов для поиска в системе GOOGLE литературных источников по теме «Фотохимические реакции нитросоединений».

Задача 2. Составить запрос для поиска информации по теме «Термодинамические свойства фуллеренов» (с использованием грамматики поисковой системы GOOGLE .

Задача 3. Опишите алгоритмы представления химической информации.

Задача 4. Опишите алгоритм проведения виртуального скрининга.

Критерии оценивания (оценочное средство - Сообщение на семинарских занятиях)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Задание выполнено полностью, студент выполнил задание и показал знание теоретического материала для его выполнения
не	Студент не выполнил задание и не знает теоретического материала для его выполнения и

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	способов его использования

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено			зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.
2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.
3. Укажите на различие подходов математики и компьютерной химии при описании химических явлений.
4. Каким образом с Вашей точки зрения можно получать новое химическое знание при помощи компьютерной химии?
5. Что такое математическая модель химического явления? Дайте определение и назовите свойства.
6. Назовите способы использования математических методов и информационных технологий в химии.
7. Можно ли воспользоваться другими, чем сумма квадратов отклонений расчетного значения от экспериментального, способами выражения степени отклонения теоретической кривой от экспериментальной?
8. Назовите наиболее важные области применения корреляционных зависимостей.

9. Опишите алгоритм поиска наилучшей корреляционной зависимости для наборов экспериментальных данных.
10. Опишите алгоритмы применения метода наименьших квадратов для спектрофотометрического анализа состава сложных смесей.
11. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.
12. Почему при поиске корреляционных зависимостей часто применяют метод наименьших квадратов? Объясните происхождение названия метода.
13. Решить методом исключения Гаусса систему уравнений 4-го порядка

$$\begin{cases} x + 4y + 2z + q = 5 \\ 3x + 5y - 2z + 2q = 7 \\ 4x - 2y + 3z - q = 3 \\ -2x + 3y - 4z + q = -6 \end{cases}$$
14. Разработать алгоритм вычисления определителя n -го порядка методом исключения элементов по Гауссу.
15. Почему метод простой итерации работает, как правило, медленнее, чем метод Зайделя?
16. Системы линейных уравнений, у которых коэффициенты при неизвестных могут различаться на несколько десятичных порядков, решаются, как правило, с трудом. Почему? Что нужно сделать, чтобы этого избежать?
17. Опишите суть алгоритма Гаусса для решения системы неоднородных уравнений с числом переменных равно числу уравнений.
18. Что такое «аналитические длины волн» в спектрофотометрическом методе анализа?
19. Как на основании вида разложения спектра поглощения смеси компонентов в виде суммы их гауссовых компонент определить наличие аналитических длин волн?
20. При каких условиях для анализа спектров поглощения сложных смесей можно пользоваться приближением аддитивности вкладов компонентов смеси?
21. Найти формулу для расчета оценочного числа шагов алгоритма в методе деления отрезка пополам для достижения наперед заданной точности.
22. Разработать алгоритм метода деления отрезка пополам для нахождения нескольких (всех) корней уравнения.
23. Можно ли в методе деления отрезка использовать его деление не на 2, а на 3 или 4 отрезка?
24. Опишите метод Ньютона-Рафсона для решения уравнения.
25. Докажите, что метод Ньютона-Рафсона быстрее, чем метод деления отрезка пополам сходится к решению уравнения.
26. Опишите алгоритм поиска корней уравнения методом Ньютона-Рафсона.
27. Назовите химические задачи, приводящие к необходимости поиска корней уравнения.
28. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Эйлера
29. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Рунге-Кутты четвертого порядка.
30. Почему с Вашей точки зрения увеличение порядка приближения Рунге-Кутты приводит к увеличению точности решения дифференциальных уравнений?
31. При решении дифференциальных уравнений численными методами наиболее точными являются решения для нескольких первых значений аргумента. Почему?

32. Что такое начальные и граничные условия? Почему их знание важно при решении дифференциальных уравнений, возникающих в химии или физике?
33. Почему математические модели, основанные на использовании дифференциальных уравнений и их систем, получили очень широкое распространение в физике и химии?
34. Почему метод Симпсона точнее метода прямоугольных трапеций ?
35. Вычисление интеграла в методе Монте Карло с ошибкой 0.01 заняло 6 секунд. Во сколько раз необходимо увеличить количество испытаний, чтобы ошибка составила 0.001?
36. Во сколько раз необходимо уменьшить шаг в методе Симпсона, чтобы точность его вычисления возросла в 10 раз? Почему в этом случае можно говорить лишь об оценочных значениях?
37. В чем отличие метода Котеса и квадратур Гаусса?
38. Когда целесообразно пользоваться методом Монте-Карло при вычислении определенных интегралов?
39. Почему метод сопряженных градиентов быстрее приводит к точке минимума, чем метод наискорейшего спуска вблизи точки минимума?
40. Почему поиск экстремума в методе Ньютона-Рафсона является очень точным?
41. Назовите преимущества и недостатки оптимизации функции методом Монте Карло.
42. В чем состоит суть приближения Метрополиса?
43. Объясните, что такое критические точки, и в чем заключаются особенности их классификации.
44. Что такое поверхность потенциальной энергии для химической реакции? Почему она существует?
45. Что такое условная оптимизация?
46. Почему метод множителей Лагранжа иногда называют методом «штрафов»? В чем суть этого метода?
47. Опишите алгоритм метода наискорейшего спуска? Почему этот метод «замедляется» вблизи экстремума?
48. Что такое ППЭ для молекулы? Назовите теоретические основы существования ППЭ в химии.
49. Что такое критические точки на ППЭ? Назовите способы их идентификации.
50. Что такое метод сопряженных градиентов? В чем его отличие от метода наискорейшего спуска?
51. Что такое матрица Гессе? Опишите основные методы ее использования в методах оптимизации.
52. Опишите алгоритм методов оптимизации Ньютона-Рафсона. Назовите его преимущества и недостатки.
53. Опишите метод оптимизации методом Монте-Карло с использованием приближения Метрополиса.
54. В чем суть метода молекулярной механики?
55. Назовите основные преимущества и недостатки метода молекулярной механики.
56. Назовите основные программные комплексы для расчетов методом молекулярной механики и опишите области их наиболее целесообразного применения.
57. Может ли молекулярной механики полностью заменить применение квантовой химии? Ответ поясните.

59. Обоснуйте применение для построения потенциалов растяжения химических связей и раскрытия валентных углов квадратичных функций соответствующих разностей между реальными значениями геометрических параметров и их «ссылочных» значений.
60. Назовите основные области успешного применения квантовой химии в химической науке.
61. Опишите алгоритм использования квантово-химических расчетов в химических исследованиях.
62. Обоснуйте применимость в химии метода ППЭ.
63. Опишите основные возможности программного комплекса Gaussian 03.
64. Назовите средние величины разностей между рассчитанными и при помощи современной квантовой химии и экспериментальными значениями химических величин.
65. Опишите принципы выбора подходящего базиса для проведения квантово-химических расчетов.
66. Опишите принципы выбора начальных геометрических параметров при проведении квантово-химических расчетов.
67. В чем состоит суть метода молекулярной динамики?
68. Какие факторы влияют на величину временного шага в методе молекулярной динамики?
69. Как можно использовать принцип "структурный фрагмент молекулы – свойство"?
70. Что такое «фармакологическая химия», и как она связана с компьютерной химией?
71. Что такое собственные значения и собственные вектора матрицы?
72. Опишите «тривиальный» метод решения задачи на собственные значения и собственные вектора.
73. В чем суть метода Якоби для диагонализации вещественной эрмитовой матрицы?

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-5

1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.
2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.
3. Каким образом с Вашей точки зрения можно получать новое химическое знание при помощи компьютерной химии?
4. Назовите способы использования математических методов и информационных технологий в химии.
5. Назовите наиболее важные области применения корреляционных зависимостей.
6. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.
7. Как на основании вида разложения спектра поглощения смеси компонентов в виде суммы их гауссовых компонент определить наличие аналитических длин волн?

8. Опишите алгоритм поиска корней уравнения методом Ньютона-Рафсона.
9. Назовите химические задачи, приводящие к необходимости поиска корней уравнения.
10. Почему математические модели, основанные на использовании дифференциальных уравнений и их систем, получили очень широкое распространение в физике и химии?
11. Объясните, что такое критические точки, и в чем заключаются особенности их классификации
12. Что такое поверхность потенциальной энергии для химической реакции? Почему она существует?
13. Что такое ППЭ для молекулы? Назовите теоретические основы существования ППЭ в химии.
14. Что такое критические точки на ППЭ? Назовите способы их идентификации.
15. Назовите основные программные комплексы для расчетов методом молекулярной механики и опишите области их наиболее целесообразного применения.
16. Назовите основные области успешного применения квантовой химии в химической науке.
17. Опишите алгоритм использования квантово-химических расчетов в химических исследованиях.
18. Обоснуйте применимость в химии метода ППЭ.
19. Опишите основные возможности программного комплекса Gaussian 03.
20. Назовите средние величины разностей между рассчитанными и при помощи современной квантовой химии и экспериментальными значениями химических величин.
21. Опишите особенности поиска информации в поисковой системе GOOGLE.
22. Перечислите принципы правильного выбора ключевых слов для поиска химической информации.
23. Что отличает химическую информацию от других видов информации?
24. Перечислите сайты, наиболее полезные для поиска химической информации.
25. Что такое хеминформатика?
26. Как можно использовать принцип "структурный фрагмент молекулы – свойство"?
27. Что такое «фармакологическая химия», и как она связана с компьютерной химией?
28. Назовите наиболее известные поисковые системы по химии и укажите их адреса.
29. Назовите наиболее известные электронные химические каталоги и укажите их адреса.
30. Что такое виртуальный скрининг?

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний и умений в объеме, превышающем программу подготовки. Владение знаниями и умениями
отлично	Уровень знаний и умений в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.
очень хорошо	Уровень знаний и умений в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок
хорошо	Уровень знаний и умений в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний и умений. Допущено много негрубых ошибки.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Кафаров Виктор Вячеславович. Методы кибернетики в химии и химической технологии : [учеб. для вузов по специальности "Основные процессы хим. пр-в и хим. кибернетика"]. - 4-е изд., перераб. и доп. - М. : Химия, 1985. - 448 с. : ил. - 1.30., 2 экз.
2. Джонсон Джеффри К. Численные методы в химии = Numerical methods in chemistry : пер. с англ. В. П. Дмитриева и др. ; под ред. А. М. Евсеева. - М. : Мир, 1983. - 504 с. : ил. - 30.00., 3 экз.
3. Каныгина О. Н. Вычислительные методы в химии : задачник для обучающихся по образовательным программам_х000d_ высшего образования по специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная_х000d_ химия и по направлению подготовки 04.03.01 химия / Каныгина О. Н. - Оренбург : ОГУ, 2019. - 99 с. - Рекомендовано ученым советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» для обучающихся по образовательным программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и по направлению подготовки 04.03.01 Химия. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ОГУ - Химия. - ISBN 978-5-7410-2274-0., <https://e->

lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=747687&idb=0.

4. Кольцова Э. М. Численные методы решения уравнений математической физики и химии : учебное пособие / Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса. - 2-е изд. ; испр. и доп. - Москва : Юрайт, 2023. - 220 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-06219-9. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=848391&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Зеленцов Сергей Васильевич. Введение в современную квантовую химию : учеб. пособие / ННГУ. - Н. Новгород : Изд-во Нижегород. гос. ун-та, 2006. - 128 с. - В надзаг.: Национальный проект "Образование". Инновационная образовательная программа Нижегород. ун-та. - ISBN 5-85746-994-9 : 15.00., 4 экз.

2. Корн Гранино А. Справочник по математике для научных работников и инженеров : Определения, теоремы, формулы / под общ. ред. И. Г. Абрамановича. - 5-е изд. ; пер. со 2-го амер. перераб. изд. /И. Г. Абрамановича и др. - М. : Наука, 1984. - 831 с. : ил. - 3.90., 6 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

<http://www.ccl.net/chemistry/>

www.compchemhighlights.org/

www.acmm.nl/molstim/

<https://www.webmo.net/>

<https://www.tau.ac.il/>

<https://research.shanghai.nyu.edu/chemistry>

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Автор(ы): Зеленцов Сергей Васильевич, доктор химических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г., протокол № 1.