

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Кафедра физической химии

УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научно-методической
учебной работе

Е.И. Скафа

» _____ апреля 2020 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«Вычислительные методы в химии»

Специальность: 04.05.01. «Фундаментальная и прикладная химия»

Образовательная программа: специалитет

Квалификация: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета


_____ Белый А.В.
подпись

«16» апреля 2020 г.

МП



Программа составлена на основе Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652; учебного плана и основной образовательной программы специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Ст. преподаватель


_____ О.С. Носуля

Доцент


_____ Н.И. Белая

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол №13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой


_____ В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической комиссии факультета


_____ Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Курс «Вычислительные методы в химии» входит в вариативную часть математического и естественнонаучного цикла дисциплин подготовки студентов ОП Специалитет по специальности 04.05.01. «Фундаментальная и прикладная химия». Дисциплина реализуется на химическом факультете ГОУ ВПО «ДонНУ» кафедрой физической химии. Основывается на базе дисциплин: «Математика», «Информатика». Является основой для изучения следующих дисциплин: «Физические методы исследования веществ», «Инструментальные методы химического анализа веществ, материалов и окружающей среды», а также при прохождении учебной и химико-технологической практик.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Специальность	04.05.01. «Фундаментальная и прикладная Химия»	
Специализация		
Образовательная программа	специалитет	
Квалификация	Химик. Преподаватель химии	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	Вариативная часть профессионального блока	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	Зачет	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	6	
Год подготовки	3	
Семестр	6	
Количество часов	216	
- лекционных	54	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	36	
- самостоятельной работы	126	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,		
в т.ч. аудиторных	5	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель:

- педагогическая – подготовка специалистов-химиков, которые умеют применять все возможности современных методов статистической обработки данных для решения текущих проблем и в частности проблем статистической обработки химического эксперимента;
- дидактическая – усвоение знаний, предусмотренных программой, благодаря целенаправленному сотрудничеству преподавателя и студента;
- методическая – выделить главные звенья в каждой теме для четкого формирования основ знаний по курсу, а также активизировать познавательную деятельность студентов, применяя различные методы активного обучения.

Задачи:

- 1) закрепление у специалиста-химика знания о том, какие процедуры статистической обработки могут быть применены для обработки экспериментальных данных, как применяются эти процедуры и какую информацию они дают;
- 2) формирование умения квалифицированно ставить задачу статистического анализа и интерпретировать результаты этого анализа;
- 3) изучить методы установления вероятностной модели измеренных величин;
- 4) изучить методы анализа данных на качество, устранения грубых промахов или уменьшения их влияния на результаты последующей обработки;
- 5) изучить методы регрессионного и корреляционного анализа.

Требования к результатам освоения дисциплины. Процесс изучения дисциплины «Информатика» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия:

а) универсальных компетенций (УК): УК-1. *Системное и критическое мышление* – способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий. *Разработка и реализация проектов* – УК-2. Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла. *Коммуникация* – УК-4. Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия. *Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)* – УК-6. Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни. *Безопасность жизнедеятельности* – УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.

б) общепрофессиональных (ОПК): *Общепрофессиональные навыки* – ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетнотеоретических работ химической направленности ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности. 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. *Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности* – ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач. ОПК-5. Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности. *Представление результатов профессиональной деятельности* – ОПК-6. Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.

в) профессиональные компетенции (ПК): *Научно-исследовательская деятельность* – ПК-1. Способен проводить сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в различных областях химии, химической технологии и смежных наук. ПК-2. Способен оформлять результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. *Технологическая деятельность* – ПК-4. Способен проводить научные исследования, совершенствовать и разрабатывать теории и методы изучения химических процессов, осуществлять практическое применение полученных знаний и результатов в различных отраслях экономики (промышленности, сельском хозяйстве и др.), связанных с переработкой сырья, полуфабрикатов,

промышленных отходов, получением и совершенствованием различных веществ, материалов, разработкой и улучшением технологических процессов. ПК-6 Способен на разработку методик проведения контроля качества для изготовителей и потребителей химической продукции. *Организационно-управленческая деятельность*. ПК-8 Способен осуществлять контроль выполнения предусмотренных планом заданий, контроль качества проведения работ, выполненных работниками подразделения и соисполнителями

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- теоретические основы статистической обработки результатов измерения и наблюдения;
- методологию проведения статистического анализа экспериментальных данных с использованием интегрированной системы STATISTICA.

уметь:

- определять базовые статистики результатов измерений как случайных величин (расчет выборочного среднего, дисперсии, среднеквадратического отклонения, коэффициента корреляции, случайной погрешности, доверительного интервала, построения гистограмм и др.);
- проводить проверку статистических гипотез (однородность дисперсий и результатов параллельных опытов, о нормальном распределении случайной величины, о равенстве двух средних и т.п.);
- проводить однофакторный линейный регрессионный и корреляционный анализ (определение параметров уравнения регрессии, их статистической значимости и случайной погрешности, расчет коэффициентов корреляции и детерминации, анализ остатков, определение доверительного интервала исследуемой функции).

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1 «Описательные статистики результатов измерений. Статистические гипотезы и их проверка»</i>	
<i>Тема 1.</i> Характеристики эмпирических распределений	Цели и задачи статистической обработки. Погрешность измерений, основные виды погрешности: математическая модель, промахи, при обработке, аппаратурные коэффициенты, систематические и случайные. Случайный характер экспериментальных данных и их представления: гистограммы, полигон частот, двумерные данные. Вычисление характеристик эмпирических распределений: начальные и центральные моменты, выборочное среднее, дисперсия, среднеквадратическое отклонение, коэффициенты вариации.
<i>Тема 2.</i> Теоретические распределения	Основные типы эмпирических распределений и их свойства. Нормальное распределение, распределения Стьюдента, Фишера, χ^2 - распределение.

Тема 3. Статистические гипотезы	Общие принципы проверки статистических гипотез, нуль-гипотеза и альтернативная гипотеза, критическая область, ошибки первого и второго рода, мощность статистического критерия. Критерии оценки статистических гипотез в задачах обработки экспериментальных данных, уровень значимости критерия и выбор его величины.
Тема 4. Проверка статистических гипотез.	Проверка статистических гипотез: нормального распределения; однородности распределения; наличие систематического сдвига математического ожидания; проверка однородности результатов параллельных опытов, методы отсева грубых погрешностей в т.ч. в двумерных выборках.
Тема 5. Доверительный интервал.	Случайная ошибка, доверительная вероятность, доверительный интервал для единичного измерения и для выборочного среднего.
Содержательный модуль 2 «Однофакторный линейный регрессионный анализ. Корреляционный анализ»	
Тема 6. Регрессионный анализ.	Регрессионный анализ. Условия, определяющие возможность получения математических моделей методом наименьших квадратов.
Тема 7. Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции: определение параметров регрессии по экспериментальным данным; остаточная дисперсия и дисперсия параметров, оценка доверительных интервалов. Проверка значимости уравнения регрессии и его коэффициентов. Анализ остатков, основные типы трендов.
Тема 8. Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции: определение параметров регрессии по экспериментальным данным; остаточная дисперсия и дисперсия параметров, оценка доверительных интервалов.
Тема 9. Корреляционный анализ эмпирических данных.	Парная корреляция, статистическое оценивание парной корреляции. Прямая и обратная регрессия, коэффициент корреляции и детерминации. Корреляционный анализ эмпирических данных, выборочный коэффициент парной корреляции. Доверительные оценки эмпирического коэффициента корреляции.

Тематический план

Содержательный модуль 1												
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Характеристики эмпирических распределений	18	4	-	2	12	-						
Тема 2. Теоретические распределения	26	4	-	-	22	-						
Тема 3. Статистические гипотезы	26	8	-	4	14	-						
Тема 4. Проверка статистических гипотез.	26	6	-	8	12	-						
Тема 5. Доверительный интервал.	18	2	-	2	14	-						
Итого по 1 содержательному модулю	114	24	-	16	74	-						
Тема 6. Регрессионный анализ.	26	8	-	6	12	-						
Тема 7. Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	26	8	-	6	12	-						
Тема 8. Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	28	10	-	8	10	-						
Тема 9. Корреляционный анализ эмпирических данных.	22	4	-	-	18	-						
Итого по 2 содержательному модулю	102	30	-	20	52	-						
Всего часов по модулю	216	54	-	36	126	-						

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Темы лекционных занятий

<i>№ n/n</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Тема 1. Характеристики эмпирических распределений	4
2	Тема 2. Теоретические распределения	4
3	Тема 3. Статистические гипотезы	8
4	Тема 4. Проверка статистических гипотез.	6
5	Тема 5. Доверительный интервал.	2
6	Тема 6. Регрессионный анализ.	8
7	Тема 7. Регрессионный анализ при однородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	8
8	Тема 8. Регрессионный анализ при неоднородности дисперсий воспроизводимости ординат измеряемой функции.	10
9	Тема 9. Корреляционный анализ эмпирических данных.	4
	ВСЕГО	54

Темы лабораторных занятий

<i>№ n/n</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Статистическая обработка результатов определения остаточного содержания стирола в двух образцах полимера	4
2	Статистическая обработка результатов определения содержания кальция в зубной эмали	6
3	Статистическая обработка результатов определения теплоты испарения хлороформа	6
4	Статистическая обработка результатов определения константы диссоциации щавелевой кислоты	6
5	Статистическая обработка результатов определения коэффициента распределения йода между толуолом и водой	6
6	Статистическая обработка результатов определения средней молекулярной массы поли- α -метилстирола.	6
7	Статистическая обработка результатов определения константы скорости и энергии активации реакции разложения мочевины в водных растворах.	8
	ВСЕГО	36

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Самостоятельная работа студентов включает текущую и творческую проблемно-ориентированную самостоятельную работу (ТСР).

Текущая самостоятельная работа по дисциплине, направленная на углубление и закрепление знаний студента, на развитие практических умений, включает в себя следующие виды работ:

- работа с лекционным материалом, учебниками и учебными пособиями при подготовке к лабораторным работам;
- работа с лекционным материалом, учебниками и учебными пособиями при подготовке и защите отчета по лабораторной работе;
- изучение темы, вынесенной на самостоятельную проработку;
- подготовка к коллоквиуму и экзамену.

При изучении тем, вынесенных на самостоятельное изучение, студент составляет конспект.

Творческая проблемно-ориентированная самостоятельная работа по дисциплине, направленная на развитие интеллектуальных умений, общекультурных и профессиональных компетенций, развитие творческого мышления у студентов, включает в себя следующие виды работ по основным проблемам курса:

Организация самостоятельной работы студентов

<i>№ n/n</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Вероятность гипотез. Формула Байеса	12
2	Повторение опытов. Формула Бернулли	22
3	Определение случайной величины. биномиальное распределения	14
4	Двумерная случайная величина	12
5	Зависимые и независимые случайные величины. Условные законы распределения	14
6	Численные характеристики двумерной случайной величины. Ковариация и коэффициент корреляции	12
7	Условные численные характеристики двумерной случайной величины	12
8	Поиск грубых ошибок неравноточных измерения	10
9	Совместимость результатов исследований	9
10	Вероятность гипотез. Формула Байеса	9
	ВСЕГО	126

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ (не предусмотрены программой)

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

1. Что такое истинное значение физической величины?
2. Что такое эмпирическое значение физической величины?
3. Дать определение погрешности (ошибки) измерения?
4. Дать определение действительному значению измеряемой величины. Какие значения могут считаться действительными?

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

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

9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

(образец варианта и критерии оценивания)

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Специальность: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Программа подготовки: **специалитет**

Семестр **6**

Учебная дисциплина **Вычислительные методы в химии**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА

ВАРИАНТ №1

Задание 1 (вставьте пропущенное определение, формулу, обозначение)

1. Критерием оценки статистической гипотезы является _____.
2. Уравнения для расчета средней взвешенной дисперсии _____ и её числа степеней свободы _____ для выборок разного объема.
3. Если при вычисления критерия Кохрена $G(0.05, f, m) < G < G(0.01, f, m)$ то _____.
4. Максимум кривой нормального распределения лежит в точке _____.
5. Если значения уровня значимости p равно 5% и более, то проверяемую гипотезу следует _____.
6. Функция плотности вероятности появления случайной величины распределения Стьюдента _____ относительно ординаты
7. Округляется число, соответствующее среднему значению: последним справа оставляются цифры тех разрядов, которые _____.
8. условия нормировки нормального распределения для получения t-распределения _____.
9. Односторонний критерий оценки статистической гипотезы _____.

10. Величина _____ является критерием Колмогорова-Смирнова.

Задание 2 (ответьте развернуто на предложенные вопросы)

1. Гауссово (нормальное) распределение. Доверительная вероятность.
2. Алгоритм статистической обработки результатов эксперимента для двух выборок данных.

Задание 3 (округлите, согласно правил округления статистической обработки результата эксперимента в химии).

(3256897±63452)

(0,0000000016823±0,00000000005612)

(243,68±0,345)

Утверждено на заседании кафедры физической химии,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

Заведующий кафедрой
Ст. преподаватель

В.М. Михальчук
О.С. Носуля

Критерии оценивания модульного контроля

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
1	5
2	7
3	3
Всего	15

10. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА
(не предусмотрены программой)

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ
(нет в наличии)

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля теоретического и практического, выполнения самостоятельной лабораторной работы и зачета.

**Распределение баллов, которые могут получить студенты
в процессе изучения дисциплины**

Организационно-учебная работа студента	Текущий контроль	Всего
	Лабораторные работы: лабораторные задания, практические задания, задания репродуктивного уровня, задания для домашней работы, контрольные практические работы. Задания к лабораторным работам. Самостоятельные лабораторные работы. Модульный контроль (теоретический, практический). Устное собеседование (коллоквиум, опрос)	100 баллов
max 5 баллов	Max 95 баллов	

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной меловой или интерактивной доской, мультимедийным проектором и экраном.

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

Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№ п/п	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
<i>Основная литература</i>			
1.	Живописцев Ф.А. Регрессионный анализ в экспериментальной физике / Ф.А. Живописцев, В.А. Иванов. – Москва: Изд-во МГУ. – 1995. – 208 с.	3	-
2.	Боровиков В.П. STATISTICA. Статистический анализ и обработка данных в среде Windows/ В.П. Боровиков, И.П. Боровиков. – Москва: Информационно-издательский дом «Филинь». – 1997. – 608 с.	2	-
3.	Спиридонов В.П. Математическая обработка физико-химических данных/ В.П. Спиридонов, А.А. Лопаткин – Москва : МГУ. – 1970. – 222 с.	15	-
<i>Дополнительная литература</i>			
4.	Дерффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дерффель. – Москва : Мир. – 1994. – 268 с.	-	-
5.	Михальчук В.М. Линейный регрессионный анализ результатов химического эксперимента в системе STATISTICA / В.М. Михальчук, А.В. Михальчук //	12	+

	Учебно-методическое пособие. – Донецк: ДонНУ, – 2002. – 66 с.		
6.	Михальчук В.М. Выполнение самостоятельных работ по курсу «Статистическая обработка эксперимента в химии» / В.М.Михальчук // Методическое пособие для студентов специальности 7.070301. – Донецк, ДонНУ, – 2003 –56 с.	12	+

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

(с указанием названия и полного электронного адреса)

StatSoft, Inc. (2001). Электронный учебник по статистике. Москва, StatSoft. WEB: <http://www.statsoft.ru/home/textbook/default.htm>. (дата обращения 20.03.2020)

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Операционная система Windows XP
2. Пакет Open Office 2010,
3. Пакет ChemOfficeDemo,
4. STATISTICA Demo 6.0.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на 20__ год.

Протокол № __ от «__» _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой

_____ В.М. Михальчук