

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 28.09.2023 14:38:54  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

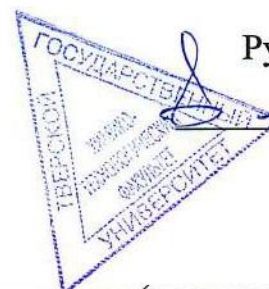
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

27 июня 2023 г



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Математические модели в корреляциях «структура – свойство»

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

Химия функциональных материалов

Для студентов 5 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Белоцерковец Н.И.

Тверь, 2023

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины:

*Математическое моделирование* широко применяется в физической химии (строение вещества, термодинамика, химическая кинетика и др.). Этим определяется значение дисциплины «Математические модели в корреляциях «структура – свойство»» для студентов V курса, специализирующихся по кафедре физической химии ТвГУ. Данная дисциплина продолжает и углубляет тематику дисциплины специализации «Математические модели в физической химии». *Предмет дисциплины* составляют молекулярные математические модели в тех областях физической химии, которые связаны с исследованием взаимосвязи свойств и строения химических соединений – одним из научных направлений кафедры физической химии ТвГУ.

**Цель дисциплины** – дать студентам углубленное представление об основных принципах математического моделирования «структура-свойство» химических веществ.

**Задачи дисциплины** – научить студентов строить математические модели и применять их для решения ряда конкретных проблем молекулярного моделирования (построение расчетных схем, расчет и прогнозирование физико-химических свойств веществ).

### 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Математические модели в корреляциях «структура – свойство»» входит в Элективные дисциплины 8 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данный курс расширяет и дополняет ранее изученные дисциплины «Моделирование молекулярных систем» и «Математическое моделирование».

**3. Объем дисциплины: 9 зачетных единиц, 324 академических часа, в том числе:**  
**контактная аудиторная работа:** лекции **26** часов, лабораторные работы **52** часа;  
**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы **90** часов;  
**самостоятельная работа:** **129** часов, контроль **27** часов.

### 4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ПК-1.3 Готовит объекты исследования

ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)
--	---

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
экзамен в 9-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа, в том числе Контроль (час.)
		Лекции	Лабораторные	Контроль самостоятельной работы	
1. Основные представления о методологии определения количественных соотношений структура-свойство: основные понятия.	24	2	2	10	10
2. Корреляционный анализ. Способы оценки силы связи между переменными величинами. Коэффициент корреляции, его значения и способы расчета. Коэффициент детерминации.	50	4	6	10	30
3. Линейная модель зависимости переменных величин. Способы проверки соблюдения линейной зависимости между величинами. Аналитический критерий соблюдения линейной зависимости между величинами. Метод выбранных точек. Метод средних	36	2	4	10	20

4. Основные математические модели (уравнения) нелинейной взаимосвязи двух переменных величин. Графический способ нахождения эмпирической формулы зависимости между двумя наборами величин. Правила построения графика. Понятия графической интерполяции и экстраполяции. Правила работы с графическим редактором программы Origin.	38	2	6	10	20
5. Вычисление констант эмпирического уравнения аналитическим и графическим способом.	40	2	8	10	20
6. Представления о методе наименьших квадратов (МНК) при вычислении констант эмпирического уравнения. Сущность МНК при расчете констант уравнения линейной зависимости между величинами, формулы расчета. Способы оценки погрешности расчета констант уравнения с помощью МНК.	28	2	6	10	10
7. . Модели химической структуры и способы их описания. Дескрипторы химической структуры, их классификация. Топологические индексы. Индекс Винера. Индекс Рандича.	36	4	6	10	16
8. Основные представления о методологии QSPR: понятия, этапы поиска корреляционного уравнения «структура-свойство» и оценки его качества. Прогнозирование свойств неизвестных химических соединений.	72	8	14	20	30
<b>ИТОГО</b>	<b>324</b>	<b>26</b>	<b>52</b>	<b>90</b>	<b>156</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
---	-------------	----------------------------

1. Основные представления о методологии определения количественных соотношений структура-свойство: основные понятия.	Лекция лабораторная работа проверка выполнения заданий	Лекция Презентация Компьютерный эксперимент Работа с текстом Конспект Составление отчета
2. Корреляционный анализ. Способы оценки силы связи между переменными величинами. Коэффициент корреляции, его значения и способы расчета. Коэффициент детерминации.	Лекция лабораторная работа проверка выполнения заданий	Презентация Компьютерный эксперимент Работа с текстом Конспект Составление отчета
3. Линейная модель зависимости переменных величин. Способы проверки соблюдения линейной зависимости между величинами. Аналитический критерий соблюдения линейной зависимости между величинами. Метод выбранных точек. Метод средних	Лекция лабораторная работа проверка выполнения заданий	Презентация Работа с текстом Конспект Компьютерный эксперимент Составление отчета
4. Основные математические модели (уравнения) нелинейной взаимосвязи двух переменных величин. Графический способ нахождения эмпирической формулы зависимости между двумя наборами величин. Правила построения графика. Понятия графической интерполяции и экстраполяции. Правила работы с графическим редактором программы Origin.	Лекция лабораторная работа проверка выполнения заданий	Конспект Презентация Работа с текстом Компьютерный эксперимент Составление отчета
5. Вычисление констант эмпирического уравнения аналитическим и графическим способом.	Лекция Лабораторная работа проверка выполнения заданий	Лекция Презентация Работа с текстом Конспект Компьютерный эксперимент Составление отчета
6. Представления о методе наименьших квадратов (МНК) при вычислении констант эмпирического уравнения. Сущность МНК при расчете констант уравнения линейной зависимости между величинами, формулы расчета. Способы оценки погрешности расчета констант уравнения с помощью МНК.	Лекция Лабораторная работа Проверка выполнения заданий	Конспект Работа с текстом Компьютерный эксперимент Составление отчета
7. Модели химической структуры и способы их описания. Дескрипторы химической структуры, их классификация. Топологические индексы. Индекс Винера. Индекс Рандича.	Лекция Лабораторная работа Проверка выполнения заданий	Лекция Презентация Работа с текстом Конспект Компьютерный эксперимент Составление отчета

8. Основные представления о методологии QSPR: понятия, этапы поиска корреляционного уравнения «структура-свойство» и оценки его качества. Прогнозирование свойств неизвестных химических соединений.	Лекция Лабораторная работа Проверка выполнения заданий	Лекция Презентация Работа с текстом Конспект Компьютерный эксперимент Составление отчета
--	--	---

#### IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

##### *Вопросы для текущего контроля*

1. Что такое молекулярная модель?
2. Раскройте основные этапы математического моделирования.
3. Назовите основные этапы методологии QSPR для установления количественных корреляций между структурой и свойствами химических соединений.
4. Как оценивается качество корреляционных уравнений?
5. Что такое коэффициент корреляции?
6. Сформулируйте и запишите в виде математического выражения линейную модель связи свойств веществ со строением молекул.
7. Как определяются параметры модельного корреляционного уравнения?
8. Опишите процедуру МНК.
9. Сопоставьте результаты расчета с экспериментом. Найдите среднюю абсолютную ошибку расчета и среднеквадратичное отклонение.
10. Дайте понятие дескриптора химической структуры и охарактеризуйте различные типы дескрипторов (геометрические, топологические, электронные).
11. Объясните правила расчета топологических индексов на основе матрицы связности и матрицы расстояний (индекс Винера, индекс Рандича и другие).

##### *Контроль самостоятельной работы*

Контроль самостоятельной работы проводится в различных формах:

- фронтальный опрос,
- письменное задание,
- устное выступление по заданной теме и др.

Примеры письменных заданий по самостоятельной работе:

Формулировка задания	Вид работы / способ
1. Последовательно ответить на все вопросы. При этом основное внимание следует уделить: Осмыслению терминов и понятий по теме занятия Основным закономерностям вычислений Последовательности действий при расчетах Расчетным формулам ( <i>расшифровать обозначения, указать единицы измерения</i> )	Конспект/Письменная работа

<p>2. В соответствии с текстом учебного пособия освоить методику расчета коэффициента корреляции:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Рассчитать коэффициент корреляции для своего варианта экспериментальных данных</li> <li>• Записать результаты в отчет</li> </ul>	Конспект/Письменная работа
<p>3. С помощью программы Origin построить</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• точечный график зависимости поверхностного натяжения от логарифма концентрации раствора для своего варианта.</li> <li>• Провести линейное сглаживание данных (Инструменты: Analysis - Fit Linear)</li> <li>• Из таблицы результатов найти значение коэффициента корреляции R (<i>программа дает значение коэффициента детерминации R-Square</i>).</li> <li>• Сравнить рассчитанные в работах 2, 3 значения коэффициента корреляции и сделать выводы о существовании линейной корреляционной зависимости между поверхностным натяжением и концентрацией раствора</li> </ul>	Конспект/Письменная работа
<p>Найти в учебном пособии ответы на вопросы и внести их в отчет по работе:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Аналитический вид линейной зависимости.</li> <li>• Почему при графической обработке данных стремятся получить линейную зависимость?</li> <li>• В чем состоит задача обработки экспериментально полученной графической зависимости?</li> <li>• Чего достигают, подбирая значения параметров теоретической зависимости?</li> <li>• О чем может свидетельствовать расхождение между экспериментальной и теоретической зависимостью?</li> </ul>	Конспект/Письменная работа

### ***Требования к рейтинг-контролю***

Рейтинг-контроль по дисциплине включает **текущий** (аудиторные занятия, самостоятельная работа) и **итоговый** контроль (экзамен).

#### ***Текущий контроль (60 баллов):***

##### **Модуль 1 (рейтинг-контроль)**

##### ***Лабораторная работа (10 баллов)***

Выполнение практической задачи –3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -2 балла

Премияльные баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

***Всего: 4 работы – 40 баллов.***

##### **Модуль 2 (рейтинг-контроль)**

##### ***Лабораторная работа (10 баллов)***

Выполнение практической задачи –3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -2 балла  
 Премия баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

*Всего: 2 работы – 20 баллов.*

**Итоговый контроль (40 баллов):**

**Экзамен** – конспект, собеседование и упражнение - 40 баллов

**Итого за семестр: 100 баллов**

**Типовые контрольные задания для промежуточного (итогового) контроля**

Планируемый образовательный результат (индикатор)	Формулировка задания	Вид работы / способ	Критерии оценивания
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР (5 баллов)	1. Перечислите этапы методологии QSPR 2. Составьте алгоритм действий при графическом способе определения параметров линейной зависимости между строением и свойством ряда веществ.	Конспект/Письменная работа	Дан полный правильный ответ – <b>5 балла</b> ; Дан правильный ответ, но допущены незначительные ошибки, не искажающие общего смысла – 4 балла; • Дан правильный ответ только для части задания – 3 балла.
ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР (10 баллов)	1. С помощью программы Origin графическую зависимость свойства ряда химических соединений от топологического индекса Винера. 2. Дайте оценку полученной математической модели на основании общепринятых статистических критериев.	Творческое задание/Письменно	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – <b>10 баллов</b> ; Дано верное решение, но допущены незначительные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 8 балла; Имеется верное решение только части задания – 5 балла.
ПК-1.3 Готовит объекты исследования (5 баллов)	1. Составьте молекулярный граф по структурной формуле соединения 2. Сформулируйте правила расчета индекса Винера для заданного углеводорода. 3. С помощью номограммы определите значение температуры кипения соединения при	Письменная работа	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – <b>5 баллов</b> ; Дано верное решение, но допущены незначительные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 4 балла; Имеется верное решение только части задания – 3 балла.



	атмосферном давлении по значению температуры кипения в вакууме.		
ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) (10 баллов)	<p>1. С помощью поисковой системы найдите и систематизируйте литературные данные по свойствам заданной группы химических веществ.</p> <p>2. Постройте классификацию дескрипторов химической структуры</p>	Творческое задание/письменно	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – <b>10 баллов</b> ; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 8 балла; Имеется верное решение только части задания – 5 балл.
ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии) (10 баллов)	<p>1. Сделайте анализ предоставленного научного текста. Назовите основные части, охарактеризуйте использованные методы исследования, обобщите результаты исследования</p> <p>2. Сравните достоинства и недостатки различных типов дескрипторов химической структуры (геометрических, топологических, электронных).</p>	Творческое задание/письменно	Дан полный правильный ответ – <b>10 баллов</b> ; Дан правильный ответ, но допущены несущественные ошибки, не искажающие общего смысла – 8 балла; • Дан правильный ответ только для части задания – 5
<b>ВСЕГО:</b>			<b>40 баллов</b>

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1) Рекомендуемая литература

#### а) Основная литература:

1. *Лейцин В.Н.* Моделирование связанных процессов в реагирующих средах [Электронный ресурс]: монография/ Лейцин В.Н., Дмитриева М.А.— Электрон. текстовые данные.— Калининград: Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, 2012.— 241 с.— Режим доступа:

<http://www.iprbookshop.ru/23805>

#### б) Дополнительная литература:

1. *Макаров А.Г.* Теоретические и практические основы физической химии [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Макаров А.Г., Сагида М.О., Раздобреев Д.А.— Электрон. текстовые данные.— Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2015.— 172 с.— Режим доступа:

<http://www.iprbookshop.ru/52335>

2. Барковский В.Ф. и др. Основы физико-химических методов анализа / Под ред. В.Ф. Барковского – М.: Высш. школа, 1983. -247 с
3. Брановицкая С.В. и др. Вычислительная математика в химии и химической технологии - Киев: Вища шк. Головное изд-во, 1986. – 216 с.
4. Агапьев Б.Д. и др. Обработка экспериментальных данных – СПб, 2001
5. Дёрффель К. Статистика в аналитической химии – М.: Мир, 1994. –

## 2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
  - Microsoft Windows 10 Enterprise
- б) Свободно распространяемое программное обеспечение
- Google Chrome
- Origin

## 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com);
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- Научная электронная библиотека (договор №SU-14-08/2014 от 14.10.2014) (<https://elibrary.ru/>)
- <http://ru.wikipedia.org/wiki/>
- <http://www.xumuk.ru/>

## 4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Научная библиотека ТвГУ (<http://library.tversu.ru>)
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» (договор № 158/08 от 10.11.2014) (<http://www.iprbookshop.ru/>)
- <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/>

## VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

### *Рекомендации по подготовке к лабораторным занятиям, контрольным работам, экзамену*

На лабораторных занятиях проводятся коллективная и индивидуальная работа по усвоению тем учебной программы дисциплины, а также небольшие контрольные работы (из 1-2 вопросов). Результаты работ учитываются при рейтинг-контроле.

Некоторые из вопросов учебной программы выносятся на самостоятельную работу, когда студент готовит конспект по заданной теме и выполняет индивидуальное задание.

По дисциплине “Математические модели в корреляциях «структура - свойство»” учебным планом предусмотрен экзамен, который включает в себя результаты рейтинг-контроля и письменный ответ на вопросы (с устными пояснениями при необходимости). При ответе на вопросы принимается во внимание знание и понимание по существу учебного материала, полнота и глубина освещения, аргументированность и грамотность ответа.

### ***Рекомендации для самостоятельной работы***

Самостоятельная работа проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования. Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу с учебником. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на основные понятия изучаемой темы, а так же на указания и рекомендации преподавателя по выполнению задания.

Помимо аудиторных занятий рекомендуется самостоятельно проработать ряд тем дисциплины по учебнику, сделать конспекты важнейших понятий и методов исследования:

### **VII. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

В ходе изучения дисциплины используется приборная база для проведения физико-химического анализа, которым располагают лаборатории кафедры химико-технологического факультета.

- Компьютеры
- Учебная аудитория с мультимедийной установкой

### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел I Аннотация.	Измены часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета

