

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи

_____” _____ 2017 р.

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ХЕМОІНФОРМАТИКА ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
ДЛЯ ХІМІКІВ

спеціальність (напря́м) 102 хімія

факультет хімічний

2017 / 2018 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету
“ 28 ” серпня 2017 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Іванов В. В., д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства.

Пантелеймонов А. В., к.х.н., доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Христенко І.В., к.х.н., доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “ 28 ” серпня 2017 року № 1

В.о.завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

_____ Коробов О.І.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 28 ” серпня 2017 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ Єфімов П.В.
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Хемоінформатика та інформаційні технології для хіміків” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалавра напрямку 102 – «Хімія»

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є надання студентам, які навчаються за напрямом „Хімія” за ОКР бакалавр базових навичок використання комп’ютерів. Студенти навчаються як кваліфіковані користувачі персонального комп’ютера та використовують комп’ютерні технології для розв’язання типових навчальних та наукових задач, працюють з текстами, оволодівають основами роботи в Інтернет, вивчають програмні пакети, що використовуються для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є

- надання студентам основ комп’ютерної грамотності;
- знайомство студентів із комп’ютерними технологіями для розв’язання типових навчальних та наукових задач;
- оволодіння програмними засобами для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.3. Кількість кредитів – 4

1.4. Загальна кількість годин – 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	2-й
Семестр	
3-й	3-й
Лекції	
32 год.	4 год.
Лабораторні заняття	
32 год.	8 год.
Самостійна робота	
56 год.	108 год.
Індивідуальні завдання	
Не передбачено	

1.6. Заплановані результати навчання.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен, згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми, досягти таких результатів:

знати: теоретичні засади інформаційних технологій та їх поєднання з актуальними хімічними задачами, принципи роботи електронно-обчислювальних машин, загальне підґрунтя побудови програмного забезпечення, основи роботи глобальних і локальних комп’ютерних мереж, спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи, принципи комп’ютерних обчислень, основні розрахункові методи, основи матричної алгебри, засади застосування матриць в опису хімічних реакцій, стехіометрію хімічних реакцій, методи розрахунку матеріального балансу, основи регресійного аналізу, теорію

інформації в хімії, теорію графів у хімії, метод адитивних схем, засоби розв'язання некоректних задач в хімічних розрахунках.

вміти: користуватися наявними програмними пакетами та пропонувати власні алгоритми для розв'язання хімічних задач, створювати документи за допомогою текстових процесорів, застосовувати редактори хімічних формул для відображення молекул і реакцій, створювати електронні презентації, створювати та обробляти таблиці даних, працювати з математичними та логічними функціями, масивами, будувати діаграми та графіки, апроксимувати експериментальні залежності фізико-хімічними закономірностями, чисельно диференціювати та інтегрувати, проводити матричні операції, розв'язувати системи лінійних рівнянь, застосувати матричний підхід до опису хімічних реакцій, використовувати рівняння матеріального балансу, застосувати регресійний аналіз для обробки експериментальних даних, використати теорію графів, топологічні індекси та адитивні схеми для розв'язання задач QSAR- та QSPR-аналізу.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

Тема 1. Загальне уявлення про хімічну інформатику

Поняття інформації, отримання, передача та збереження інформації. Кодування інформації. Двійкове кодування інформації в комп'ютері. Одиниці вимірювання інформації.

Тема 2. Принципи роботи електронно-обчислювальних машин

Архітектура комп'ютера. Загальна схема пристроїв: системний блок, пристрої вводу та виводу інформації. Склад, принципи роботи та характеристики процесора. Пам'ять, різновиди пам'яті. Запам'ятовуючі пристрої (накопичувачі на жорстких та гнучких дисках, вінчестер, носії інформації).

Тема 3. Загальне програмне забезпечення

Програмне забезпечення роботи комп'ютера. Класифікація програмного забезпечення: системне, прикладне, інструментальне. Системне програмне забезпечення. Поняття, функції, характеристики операційних систем. Типи операційних систем. Поняття файлу, файлової системи.

Тема 4. Глобальні та локальні комп'ютерні мережі

Комп'ютерні мережі. Призначення та типи комп'ютерних мереж. Апаратне забезпечення мережі. Глобальна мережа Internet. Поняття протоколу. Правила адресації Internet. Основні служби Internet.

Тема 5. Спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи

Програмне забезпечення для хіміків. Пошукові системи. Бази даних для хіміків. Сучасні редактори для хімічних текстів. Візуальне відображення молекул, структур та експериментальних даних. Спеціалізовані хімічні програми.

Тема 6. Принципи комп'ютерних обчислень

План побудови розрахункового експерименту. Джерела похибок результатів. Формати представлення даних, точність запису. Основи програмування. Поняття машинного епсилон.

Тема 7. Огляд основних розрахункових методів

Оптимізація. Апроксимація. Лінеаризація функцій. Чисельні методи. Застосування розрахункових методів для розв'язання прикладних хімічних задач.

Тема 8. Основи матричної алгебри

Основи матричної алгебри. Алгебра векторів. Матриця як лінійне перетворення векторів. Спеціальні матриці (нульова, одинична, скалярна). Операції з матрицями. Функції від матриць. Ранг матриці. Вироджені матриці. Норма матриці. Детермінант матриці. Обернена матриця. Розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Матричне представлення. Числа обумовленості матриці. Задача на власні значення. Матриці проектування та спектральний розклад.

Тема 9. Матриці в опису хімічних реакцій

Використання матриць для опису будови хімічної речовини. Представлення брутоформули речовини у вигляді векторів. Атомна матриця. Теорема про ранг атомної матриці. Побудова атомних матриць молекулярних та іон-молекулярних сумішей. Узагальнена атомна матриця яка ураховує структурну будову речовини на прикладі насичених вуглеводнів.

Тема 10. Стехіометрія хімічних реакцій

Матриці у хімічних реакціях. Зображення реакцій у алгебраїчній формі. Кількість лінійно незалежних реакцій, що описують задану реакційну суміш. Ранг стехіометричної матриці. Стехіометричне правило Гіббса. Вибір незалежних компонент у розрахунках стехіометричних коефіцієнтів. Приклади розрахунків реакційних сумішей.

Тема 11. Розрахунки матеріального балансу

Рівняння матеріального балансу. Побудова стехіометричної матриці методом прямого обернення субматриць. Кількість речовини у ході реакції. Повнота реакції. Розрахунок матеріального балансу за допомогою стехіометричних співвідношень. Параметричне рівняння простої та складної реакції. Ліва обернена матриця. Ключові речовини. Інваріант хімічної реакції. Теореми про змінення хімічного складу під час реакцій.

Тема 12. Основи регресійного аналізу

Регресійний аналіз у хімії. Уявлення про рівняння регресії. Полілінійна (множинна лінійна) регресія. Метод найменших квадратів. Стандартне відхилення та коефіцієнт кореляції. Методики перехрестного оцінювання (LOO). Метод найменших модулів.

Тема 13. Теорія інформації в хімії

Теорія інформації та її використання у хімії. Загальне поняття про інформацію. Формула Шеннона. Зв'язок інформації з ймовірністю. Одиниці виміру інформації. Використання інформації у хімії. Зв'язок інформації з ентропією. Інформаційні структурні індекси. ID, IC0, IC1, IC2 та інші похідні індекси. Проблема прогнозу біологічної активності молекул.

Тема 14. Теорія графів у хімії

Елементи теорії графів. Поняття про граф. Задача Ейлера. Орієнтований та неорієнтований граф. Двудольний граф. Маршрут у графі, ланцюг, цикл. Топологічна матриця. Матриця інцидентності та матриця дистанцій. Деякі теореми з теорії графів. Проблема перерахування ізомерів. Уявлення про теорію Пойа. Топологічні інваріанти графа. Структурні індекси молекул (індекс Вінера, індекс Рандіча). Застосування графів у дослідженні хімічних реакцій.

Тема 15. Метод адитивних схем

Адитивні схеми у проблемі розрахунків фізико-хімічних характеристик молекул. Методи розкладення структури молекул на фрагменти. Матричне формулювання розрахунків структурних інкрементів. Метод Гатєвського. Температури атомізації та ізомерізації насичених вуглеводнів. Ліпофільність вуглеводнів та октанові числа. Еквівалентність та нееквівалентність різноманітних адитивних схем. Проекційний та статистичний метод оцінювання адитивних схем. Матрична формулювання методу найменших квадратів.

Тема 16. Некоректні задачі в хімічних розрахунках

Методи вирішення некоректних задач регресійного аналізу. Загальне уявлення про коректні та некоректні фізико-хімічні задачі. Некоректність за Адамаром та Тихоновим. Число обумовленості матриці. Псевдообернена матриця. Рівняння Пуассона. Розрахунки псевдооберненої матриці. Псевдорозв'язки прикладної матричної задачі. Метод регуляризації за Тихоновим. Функціонал Тихонова. Нормальне рівняння. Вибір параметру регуляризації.

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 17. Створення документів за допомогою текстових процесорів.

Тема 18. Знайомство з редактором хімічних формул.

Тема 19. Створення презентацій.

Тема 20. Знайомство з електронними таблицями.

Створення таблиці даних. Робота з математичними та логічними функціями. Робота з масивами. Побудова діаграм та графіків.

Тема 21. Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.

Створення таблиці даних. Побудова графіків. Апроксимація залежностей.

Тема 22. Знайомство з програмами математичного моделювання.

Основні арифметичні операції. Диференціювання. Інтегрування. Побудова графіків. Операції з матрицями. Розв'язання системи лінійних рівнянь.

Тема 23. Застосування матриць при описі хімічних реакцій.

Тема 24. Рівняння матеріального балансу.

Тема 25. Регресійний аналіз.

Тема 26. Теорія графів та топологічні індекси.

Тема 27. Адитивні схеми.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
л		п	лаб.	інд.	с. р.	л		п	лаб.	інд.	с. р.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу												
Разом за розділом 1	60	32				28	58	4				54
Розділ 2. Лабораторні заняття												
Разом за розділом 2	60			32		28	62		8			54
Усього годин	120	32		32		56	120	4	8			108

4. Теми лабораторних (практичних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денне	Заоч.
Тема 17.	Створення документів за допомогою текстових процесорів.	2	1
Тема 18.	Знайомство з редактором хімічних формул.	1	
Тема 19.	Створення презентацій.	1	
Тема 20.	Знайомство з електронними таблицями.	4	1
Тема 21.	Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.	4	1
Тема 22.	Знайомство з програмами математичного моделювання.	2	1
Тема 23.	Застосування матриць при описі хімічних реакцій.	4	1
Тема 24.	Рівняння матеріального балансу.	4	1
Тема 25.	Основи регресійного аналізу.	4	1
Тема 26.	Теорія графів та топологічні індекси.	4	1
Тема 27.	Адитивні схеми	2	
	Разом	32	8

5. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	Заоч.	Заоч.
Тема 1. Загальне уявлення про хімічну інформатику	2	4
Тема 2. Принципи роботи електронно-обчислювальних машин	2	4
Тема 3. Загальне програмне забезпечення	2	4
Тема 4. Глобальні та локальні комп'ютерні мережі	2	4
Тема 5. Спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи	2	4
Тема 6. Принципи комп'ютерних обчислень	2	4
Тема 7. Огляд основних розрахункових методів	2	4
Тема 8. Основи матричної алгебри	2	4
Тема 9. Матриці в опису хімічних реакцій	2	4
Тема 10. Стехіометрія хімічних реакцій	2	4
Тема 11. Розрахунки матеріального балансу	2	4
Тема 12. Основи регресійного аналізу	2	4
Тема 13. Теорія інформації в хімії	2	4
Тема 14. Теорія графів у хімії	2	4
Тема 15. Метод адитивних схем	2	4
Тема 16. Некоректні задачі в хімічних розрахунках	2	4
Тема 17. Створення документів за допомогою текстових процесорів	2	4
Тема 18. Знайомство з редактором хімічних формул	2	4
Тема 19. Створення презентацій	2	4
Тема 20. Знайомство з електронними таблицями.	2	4
Тема 21. Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.	2	4
Тема 22. Знайомство з програмами математичного моделювання.	2	4
Тема 23. Застосування матриць при описі хімічних реакцій	2	4
Тема 24. Рівняння матеріального балансу	2	4
Тема 25. Регресійний аналіз	4	4
Тема 26. Теорія графів та топологічні індекси	2	4
Тема 27. Адитивні схеми	2	4
Разом	56	108

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Перевірка результатів лабораторних робіт. Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Схема нарахування балів

Для допуску до семестрового екзамену студенти мають виконати усі лабораторні і контрольні роботи.

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Разом	Екзамен	Сума
Розділ 1	Розділ 2						
T1-T16	T17 - T20	T21-T22	T23-T24	T25-T27			
10	10	10	15	15	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70 – 89	добре
50 – 69	задовільно
1 – 49	незадовільно

9. Рекомендована література

Основна література

1. Вступ до інформаційних технологій. Методичний посібник для викладачів і студентів. Під ред. Зарецької І. Т., Владимирової М. В. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006. – 364 С.
2. Информатика. Базовый курс / Под ред. Симонович С. В. и др. – СПб.: Питер, 2001. – 640 с.
3. Таненбаум Э. Архитектура компьютера. – СПб.: : Питер, 2003. – 698 с.
4. Яшкин В. И. Численные методы в химии. Аппаратное и программное обеспечение. – Мн.: БГУ, 2002. – 95 с.
5. Савчук Л. О., Гримпинюк О. В. Информатика та комп'ютерна техніка. – К.:Професіонал, 2004. – 160 с.
6. Программное обеспечение и "неотложка" для компьютера:/ В. Б. Марысаев. – М.: ТЕРРА – Книжный клуб, 2001. – 383 с.
7. Системное программное обеспечение: Учебник для вузов: / А. В. Гордеев и А. Ю. Молчанов; Гл.ред. Е.Н. Строганова . - СПб.; М.; Х.; Минск: Питер, 2003. – 736 с.
8. В. Л. Бройдо Вычислительные системы, сети и телекоммуникации. 2-е изд. – СПб.: Питер, 2005
9. Компьютерные сети и сетевые технологии: перевод с англ. / М. А. Спортак, Ф. Ч. Паппас, Р. Пит и Э. Рензинг. – М.; СПб.; К.: ДиаСофт, 2002 .
10. Зимянин Л. Ф. Компьютерные сети: курс лекций / Л. Ф. Зимянин. – Минск: Издательство Белорусского университета, 2006 . – 336 с.
11. Таненбаум Э. Компьютерные сети: перевод с англ. В. Шрага. – 4-е изд.– СПб.; М.; Х.; Минск : Питер, 2005 . - 992 с.
12. Столлингс В. Компьютерные сети, протоколы и технологии Интернета: перевод с англ. / Пер. А. Никифоров. - СПб. : БХВ-Петербург, 2005
13. Неділько С. А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005.- 256 с.
14. Химические приложения топологии и теории графов. – М.: Мир, 1987.
15. Иванов В. В., Слета Л. А., Расчетные методы прогноза биологической активности органических соединений. Учебное издание. – Харьков, ЧП Азамаев В. Р. 2003. – 75 с.
16. Демиденко Е. З. Линейная и нелинейная регрессии. – М. Финансы и статистика, 1981. – 302 с.
17. Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е., Филиппов Г. Г., Методы линейной алгебры в физической химии. – М.: из-во московского университета, 1976. – 360с.
18. Беклемишев Д. В., Дополнительные главы линейной алгебры, М.:Наука, 1983. – 335 с.
19. Джонсон К, Численные методы в химии. – М.Мир, 1983. – 503 с.

20. Руданський Ю. К., Мокрий Є. М., Піх З. Г., Чип М. М., Куриляк І. Й. Математичні методи в хімії та хімічній технології. – Львів: Світ, 1993.– 203 с.
21. Шараф М. А., Иллмен Д. П., Ковальски Б. Р., Хемометрика. – Л. Химия, Ленинградское отделение, 1989. – 269 с.
22. Пантелеймонов А. В., Христинко І. В., Іванов В. В., Холін Ю. В. Інформатика та інформаційні технології для хіміків : Навчальний посібник. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2011. – 60 с.

Допоміжна література

1. Лоусон Ч., Хенсон Р., Численное решение задач метода наименьших квадратов. – М.:Наука, 1986, 230 с.
2. Загоруйко Н. Г., Елкина В. Н., Лбов Г. С., Алгоритмы обнаружения эмпирических закономерностей. – Новосибирск, из-во Наука. Сибирское отделение, 1985.
3. Лбов Г. С., Методы обработки разнотипных экспериментальных данных. – Новосибирск, из-во Наука. Сибирское отделение, 1981.
4. Meintjes K., Morgan A., A methodology for solving Chemical Equilibrium Systems, Applied Mathematics and Computation, 1987, **22**, p.333-361
5. Статистические методы для ЭВМ/под ред. К. Энслейна, Э. Релстона, Г. С. Уилфа. – М.Наука, 1986. – 460 с.
6. Мудров В. И., Кушко В. Л., Метод наименьших модулей.– М.: Знание, 1971.– 60 с.
7. Мудров В. И., Кушко В. Л., Методы обработки измерений.– М.: Советское радио, 1976.– 190 с.
8. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я., Методы решения некорректных задач.–М: Наука, 1986.– 287.
9. Морозов В. А., Регулярные методы решения некорректно поставленных задач.– М:Наука.– 1987.– 239 с.

Інформаційні ресурси

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В. Н. Каразіна:
<http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk>
2. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/>