

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 17.05.2024 15:03:19

Уникальный программный ключ:

sa953a01201891083f939673078ef1a9870ae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»**

Факультет физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Анализ данных в химии

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.04.01 «Химия»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

«Современная интегративная химия»

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2024 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Анализ данных в химии» является сформировать способность организовывать статистическое исследование данных с целью выявления, установления закономерностей, статистических моделей для целей прогнозирования и статистически обоснованного принятия решений; применять современные программные средства и технологии для работы с данными. Дисциплина направлена на: изучение статистических моделей, методов, средств и пакетов анализа данных, основ корреляционного, регрессионного, дисперсионного и факторного анализа и кластеризации.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Анализ данных в химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-7	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-7.1. Использует цифровые технологии и методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии;
		УК-7.2. Разрабатывает концепцию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры;
		УК-7.3. Осуществляет мониторинг использования цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план использования цифровых технологий.
ОПК-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук;
		ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук;

	современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.
ОПК-2	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их;
		ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.
ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-1.1 Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий;
		ПК-1.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Анализ данных в химии» относится к *вариативной* компоненте блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Анализ данных в химии».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
УК-7	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить		Актуальные задачи современной химии Организация и планирование научных исследований Выполнение магистерской диссертации Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
	логические умозаключения на основании поступающих информации и данных		
ОПК-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения		Актуальные задачи современной химии Организация и планирование научных исследований Химия наноструктурированных систем Выполнение магистерской диссертации Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ОПК-2	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук		Организация и планирование научных исследований Выполнение магистерской диссертации Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках		Актуальные задачи современной химии Организация и планирование научных исследований Модуль: Избранные главы основных направлений химии Модуль: Современные проблемы химии Модуль: Неорганическая химия Модуль: Органическая химия Модуль: Физическая химия Выполнение магистерской диссертации Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Анализ данных в химии» составляет 5 зачетных единиц.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		1	2	3	4
Контактная работа, ак.ч.	54	54			
в том числе:					
Лекции (ЛК)	18	18			
Лабораторные работы (ЛР)					
Практические/семинарские занятия (СЗ)	36	36			
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	108	108			
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.	18	18			
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	180	180		
	зач.ед.	5	5		

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
Раздел 1. Статистический анализ по химии	Тема 1.1. Введение в анализ данных по химии. Основы статистики и их роль в химических исследованиях.	ЛК, СЗ
	Тема 1.2. Машинное обучение: основные понятия и методы. Применение машинного обучения в химическом анализе данных. Планирование экспериментов и оптимизация процессов в химии.	ЛК, СЗ
Раздел 2. Анализ данных в химической промышленности и химическом материаловедении.	Тема 2.1. Анализ временных рядов химических данных. Биоинформатика и химический анализ биомолекул.	ЛК, СЗ
	Тема 2.2. Анализ данных в химической промышленности. Анализ данных в химическом материаловедении.	ЛК, СЗ
	Тема 2.3. Кластеризация и классификация данных по химии.	ЛК, СЗ
Раздел 3. Проектная работа по анализу данных по химии	Тема 3.1. Анализ данных по химической термодинамике. Анализ данных по химической кинетике.	ЛК, СЗ
	Тема 3.2. Эффективное использование программного обеспечения для анализа данных в химии.	ЛК, СЗ
	Тема 3.3. Этика и конфиденциальность данных при химическом анализе.	ЛК, СЗ
	Тема 3.4. Проекты и исследования в области анализа данных в химии.	ЛК, СЗ

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Семинарская	Аудитория для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Анализ данных: Учебник для вузов / В. С. Мхитарян [и др.]; под редакцией В. С. Мхитаряна. – Москва: Издательство Юрайт, 2023. – 490 с.
2. Анализ данных в Excel. Наглядный курс создания отчетов, таблиц и диаграмм» / А. В. Макаров, И. И. Муравьев. – СПб: Питер, 2020. – 320 с.
3. Статистика: Учебник / В. Г. Малышев, В. Н. Чижиков, Н. И. Чернова и др. - Москва: Юрайт, 2019. - 608 с.
4. Анализ данных на Python с использованием библиотеки Pandas/ Лукас Присс, Теодор Боде. — Москва: ДМК Пресс, 2021. — 400 с.

Дополнительная литература:

1. Математическая статистика и теория вероятностей: Учебник / В.И. Боровков, А.А. Боровков. — Москва: Наука, 2018. — 592 с.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС Библиотека КазНУ им. аль-Фараби <https://elibrary.kaznu.kz/ru/>

2. ЭБС РУДН им. П. Лумумбы и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:

- Электронно-библиотечная система РУДН им. П. Лумумбы – ЭБС РУДН им. П. Лумумбы <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>
- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>
- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС «Троицкий мост»

3. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации <http://docs.cntd.ru/>
- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
- поисковая система Google <https://www.google.ru/>
- реферативная база данных SCOPUS <http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Professional scientific databases

1. <https://arxiv.org/>
2. <https://www.kaggle.com/datasets>

Internet resources

1. <https://www.my-mooc.com/ru/categorie/analiz-dannyh>
2. eduson . _ academy

Software

1. <https://www.python.org/downloads/>

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Анализ данных в химии» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

РАЗРАБОТЧИКИ:

Профессор кафедры
аналитической, коллоидной
химии и технологии редких
элементов факультета химии и
химической технологии КазНУ
им. аль-Фараби

Должность, БУП

Надиров Р.К.

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Кафедра органической химии

Наименование БУП

Воскресенский Л.Г.

Подпись

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Декан ФФМиЕН, заведующий
кафедрой органической химии

Должность, БУП

Подпись

Воскресенский Л.Г.

Фамилия И.О.