

ПУТЕВОДИТЕЛЬ ПО ГЛОССАРИЮ, СОСТАВЛЕННОМУ ДЛЯ ДИСЦИПЛИНЫ «ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ»

Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор;

Сальникова Е.В., канд.хим.наук, доцент;

Юрова М.С., Назмутдинова А.О., Калименова К. А., Кулешова В.В.,

Толстых В.Е., Федосова К.В., Юсупова К.В.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Анонсируется толковый словарь – глоссарий, составленный для дисциплины «Вычислительные методы в химии», предназначенный для студентов, обучающихся по направлению «Химия». Определения специальных терминов сопровождаются иллюстрациями

Ключевые слова: глоссарий, термин, компетенции

В процессе изучения новой дисциплины «Вычислительные методы в химии» появились новые незнакомые нам специальные термины, и в связи с этим возникла необходимость в упорядоченности получаемых знаний. Существует много вариантов регламентирования терминов, но нужно выбрать такой, чтобы он совмещал в себе одновременно научную сторону, облегчал процесс изучения данной дисциплины, был доступным и понятным. Одним из таких способов, по-нашему мнению, самым интересным и функциональным, является глоссарий. В начале изучения дисциплины абсолютное большинство из студентов-первокурсников не знало о существовании подобного терминологического словаря, поэтому мы решили создать его лично, изучить его историю, проанализировать готовые глоссарии по другим дисциплинам, сделать вывод о проделанной работе и презентовать результат.

Первые глоссарии в России появились в эпоху раннего развития письменности и назывались «словарными трудами». Словарные труды объясняли непонятные «неразумные» слова в рукописных книгах. Толкование или перевод непонятого слова назывались глоссой (греч. glōssa — язык, речь). Глоссы чаще всего делались на полях и между строк в тексте рукописи. В результате сведения глосс в единые перечни и появились первые словарики, присоединяемые к тому или иному произведению, получившие название глоссарий. Наиболее древний русский глоссарий, приложенный к Кормчей книге, памятнику 1282 года, насчитывал 174 слова (рисунок 1). В позднейших списках число слов увеличилось до 300. Новгородский словарь 1431 г., вначале насчитывавший 61 слово, был дополнен до 200 слов (рисунок 2).

Эти словари отличались синкретичным характером: содержали разнообразную информацию о слове и были своего рода энциклопедическими справочниками. Древнерусские книжники стремились перевести иноязычные слова, истолковать значения непонятных слов, обозначающих чуждые реалии, неизвестные понятия, объяснить собственные имена, упоминаемые в данном памятнике,

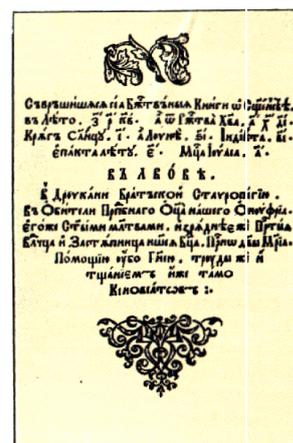
раскрыть символику текста, сообщить иную информацию, необходимую для понимания смысла памятника[1].



Рисунок 1– Кормчая книга русской редакции 1280-е (1282) г. середина XIV в. (л. 628-631) Переплет середины XIV в. [2]



Рисунок 2 – Новгородский словарь 1431 года, найденный в новгородском монастыре на Лисичьей горе.[3]



Так что же такое глоссарий? Глоссарий – (от латинского «glossarium» - собрание») словарь узкоспециализированных терминов в какой-либо отрасли знаний с толкованием, иногда переводом на иностранный язык, с комментариями и иллюстрациями [4]. Новейший словарь иностранных слов и выражений трактует значение слова похожим образом: «Глоссарий – собрание непонятных слов или выражений с толкованием или переводом на другой язык (переводной глоссарий, толковый глоссарий)»[5]. Говоря обобщенно, глоссарий - словарь терминов, объединенных одной тематикой, представляющий собой объяснение и характеристику каждого термина в отдельности. На данный момент существует большое количество глоссариев по разным тематикам и дисциплинам на различных языках мира, что говорит о его пользе и актуальности повсеместно.

Мы постарались создать глоссарий в помощь, современной системе обучения, совместив в нем понятность и точность знаний, но при этом, что очень важно, не потеряв научный язык. Для получения высшего образования студенты должны обладать умением правильно разговаривать на научном языке, как своего профиля, так и профиля своего собеседника. Обучающие должны уметь обмениваться знаниями и опытом между собой, обладать достаточным уровнем коммуникативности, что означает правильно перекодировать передаваемую информацию, чтобы она была без искажений принята и декодирована реципиентом.

Вовремя изучения дисциплины «Вычислительные методы в химии» мы попытались составить в помощь однокурсникам глоссарий, при этом главной задачей считали доступность изложения при сохранении смысла современного научного языка. Цель создания глоссария – дать краткую и понятную интер-

претацию научных терминов, важных в статистической обработке результатов химического эксперимента, чтобы активно их использовать в процессе своего обучения.

Глоссарий никогда не потеряет своей актуальности. Современная наука эволюционирует с каждым годом, объем знаний увеличивается, совершенствуются способы получения информации, и поэтому возникает постоянная, непрерывная необходимость в упорядочении, накоплении и урегулировании полученных знаний для нас и для будущего поколения. Одновременно с ростом развития науки должна увеличиваться и профессиональная компетенция специалиста. Данный глоссарий будет способствовать улучшению качества образования студентов, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 Химия и приобретению ими профессиональных компетенций, например, таких как: коммуникация (обучающийся должен быть способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах)), разработка и реализация проектов(обучающийся должен быть способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений [6]. Специалист должен обладать общепрофессиональными навыками:

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений
ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием
ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

Описание глоссария

Наш глоссарий позволяет ознакомиться с терминами, используемыми в современных учебниках и учебных пособиях, посвященных описаниям методов экспериментальных исследований А.В.Стряпкова «Математическая обработка результатов химического эксперимента» [7], О.Н.Каныгиной, А.Г.Четвериковой, В.Л.Бердинского «Физические методы исследования веществ» [8], и Т.Я.Деминой, Н.И.Шефер «Основы кристаллографии» [9]. В особенности помощь глоссария ощущается в работе с объемными научными текстами, сложными для полного понимания изучаемого материала. Глоссарий

чрезвычайно полезен и для студентов и для преподавателей как средство повышения уровня профессиональной информированности, интеллектуальности и образованности.

Составление глоссария представляет собой трудоемкий и длительный процесс тщательной обработки информации и выделения самого главного по субъективному мнению составителей. Поэтому глоссарии по своей природе самобытны или уникальны. Глоссарий построен по типу традиционного словаря, представлен в виде терминов, расположенных в алфавитном порядке с дополнительными комментариями, большая часть терминов визуализирована с помощью иллюстраций. Список терминов в глоссарии соблюдает нейтральность, то есть критерий включения элементов в список не приводит к доказательству какой-либо точки зрения, и основывается на авторитетных источниках. Термины в созданном словаре точно формулируются и представляют собой содержательную часть, объемно раскрывающую смысл данного понятия. В глоссарий включены аббревиатуры, слоганы, отдельные слова и фразы, рисунки и диаграммы.

В представляемом глоссарии собраны термины одной тематики, поэтому им легко пользоваться. Некоторые из объясняемых слов имеют несколько трактовок, иногда существенно различающихся между собой. Представим для наглядности один термин из созданного глоссария: вычислительная химия - раздел химии, в котором математические методы используются для расчета молекулярных свойств, моделирования поведения молекул, планирования синтеза, поиска в базах данных и обработки комбинаторных библиотек. Вычислительная химия использует результаты классической и квантовой теоретической химии, реализованные в виде эффективных компьютерных программ, для вычисления свойств и определения структуры молекулярных систем.

Другой вариант трактовки: вычислительная химия — это термин, который аккумулирует в себе все компьютерные методы исследования процесса.

Благодаря иллюстрациям и комментариям к определениям терминов обеспечена их наглядность и очевидность. Например: Аппроксимация (приближение) – замена математического объекта более простым объектом имеющие сходные свойства. Рисунок 3, приведенный ниже, демонстрирует показательность и ясность данного определения.

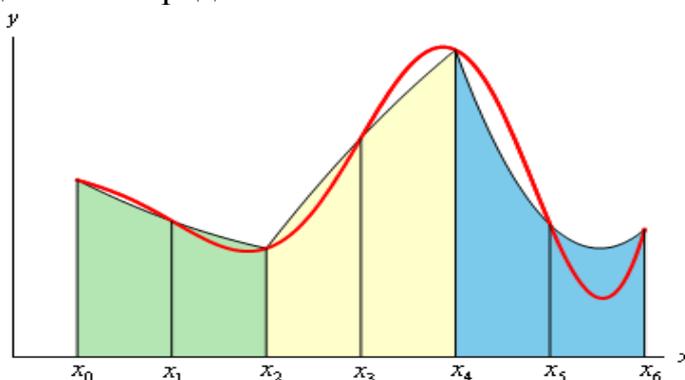


Рисунок 3 – График аппроксимирующей функции

Пусть задается в табличном виде. Требуется найти некоторую аналитическую функцию, приближенно описывающую заданную табличную зависимость, и определить значения функции в других точках, отличных от заданных табличных значений, методом приближения (аппроксимации). В этом случае находят некоторую функцию $f(x)$, такую, чтобы отклонения ее от заданной табличной функции было наименьшим. Функция $f(x)$ называется аппроксимирующей. Вид аппроксимирующей функции существенным образом зависит от исходной табличной функции. В зависимости от исходных данных функцию $f(x)$ выбирают в виде экспоненциальной, логарифмической, степенной, синусоидальной, полиномиальной и т.д. В каждом конкретном случае её выбирают таким образом, чтобы достичь максимальной близости аппроксимирующей и табличной функций. Разности $y_i - y$ называются отклонениями и представляют ошибку аппроксимации одного значения данной табличной функции. Для оценки качества аппроксимации функции в целом требуется оценить суммарную ошибку. Есть разные способы оценки суммарной ошибки аппроксимации. Чаще всего оценивают суммарную квадратичную ошибку, равную сумме квадратов отклонений эмпирических значений функции от теоретических. Параметры x_0, x_1, \dots, x_n должны быть определены из условия минимума суммарной квадратичной ошибки. Следовательно, аппроксимация – замена одной функции другой, близкой к первой и достаточно просто вычисляемой с помощью метода наименьших квадратов.

Таким образом, глоссарий является неотъемлемой частью науки и научного языка в целом. Научный язык не терпит неточностей и недопонимания, поэтому глоссарий гарантирует отсутствие искажения смысла изучаемого текста по данной дисциплине и упрощает запоминание и понимание научной терминологии. Глоссарий существенно облегчает работу студента, помогает ему постигнуть новые знания и упорядочить их.

Список литературы

1. Режим доступа: <https://biznes-prost.ru/glossarij.html>
2. Режим доступа: <http://old.stsl.ru/manuscripts/staropechatnye-knigi/16-1>
3. Режим доступа: <https://mayak-parnasa.livejournal.com/323077.html>
4. Брокгауз, Ф. А., Ефрон, И. А. - Энциклопедический словарь. В 86 т. Репр. воспр. изд. «Энциклопедический словарь Ф. А. Брокгауза и И. А. Ефрона». — СПб.: Фирма «ПОЛРАДИС», АОТ «Иван Фёдоров», 2003. — 40726 с. - ISBN 5-275-01402-3
5. Большая Российская энциклопедия. — М.: Научное издательство, «Большая Российская энциклопедия», 2005. — ISBN 5-85270-330-3
6. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01. химия – ОГУ, приказ от 17 июля 2017 г. N.671

7. Стряпков, А.В., Минаева, В.А., «Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебное пособие. – Оренбург: ГОУ ОГУ, 2005.- 166с. – ISBN 5-7410-0550-0

8. Каныгина, О.Н., Четверикова, А.Г. Бердинский, В.Л. «Физические методы исследования веществ»: учебное пособие; Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ, 2015. – 141 с. – ISBN 978-5-7410-1222-2

9. Шефер, Н.И., Демина, Т.Я. Основы кристаллографии: учебное пособие по дисциплине «Кристаллография с основами кристаллохимии»/ Изд. 2-е, перераб. и доп. – Оренбург: ИПК ГОУ ОГУ, 2005.- 235с.- ISBN 5-7410-0615-9