

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Б1.О.02.03 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И  
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ  
Математические методы в химии

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

04.03.01.32 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2021

Красноярск 2022

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Программу составили \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

должность, инициалы, фамилия

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью преподавания дисциплины «Математические методы в химии» является овладение студентами методами и практическими навыками обработки результатов экспериментов.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачи изучения дисциплины: теоретическое и практическое освоение основных понятий и закономерностей методов теории вероятности и математической статистики.

Изучение дисциплины способствует:

- Пониманию роли теории вероятности и математической статистики в системе наук.
- Приобретению специальных знаний по методологии выбора методов обработки результатов анализов.
- Развитие навыков математической обработки эксперимента

### 1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
<b>ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</b>	
ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	
ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	
<b>ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</b>	
ОПК-4.1: Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	

ОПК-4.2: Обрабатывает данные с использованием стандартных способов	
аппроксимации численных характеристик	
ОПК-4.3: Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	
<b>ОПК-5: Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности</b>	
ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	
ОПК-5.2: Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности	

#### **1.4 Особенности реализации дисциплины**

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>2 (72)</b>	
занятия лекционного типа	1 (36)	
практические занятия	1 (36)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>1 (36)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
<b>1. Модуль 1</b>									
	1. Предмет теории вероятностей. Статистическая устойчивость. Операции над событиями. Вероятность, аксиомы вероятности. Классическое определение вероятности. Частотная интерпретация вероятности.	4							
	2. Элементы комбинаторики (число размещений, сочетаний и перестановок). Урновая схема. Выборки с возвращением и без возвращения.	4							
	3. Геометрические вероятности. Свойства вероятности: теоремы сложения, формулы для вероятности объединения $n$ событий. Независимость событий. Условная вероятность. Формула полной вероятности. Формула Байеса	4							
	4. Схема независимых испытаний Формулы Бернулли . Наиболее вероятное число успехов. Локальная и интегральная теоремы Муавра-Лапласа	4							

5. Случайные величины. Функция распределения и ее свойства. Понятие плотности распределения. Распределения случайных величин. Ряд и плотность распределения, их свойства. Примеры распределений: биномиальное, гипергеометрическое, Пуассона, равномерное, нормальное, экспоненциальное.	2							
6. Независимость случайных величин. Числовые характеристики случайных величин. Математическое ожидание и дисперсия и их свойства. Моменты. Коэффициент корреляции и его свойства	4							
7. Нормальное распределение. Распределения, связанные с нормальным — $\chi^2$ , Стьюдента, Фишера.	4							
8. Операции над событиями. Вероятность, аксиомы вероятности. Классическое определение вероятности. Элементы комбинаторики (число размещений, сочетаний и перестановок). Урновая схема. Выборки с возвращением и без возвращения.			4					
9. Геометрические вероятности. Свойства вероятности: теоремы сложения, формулы для вероятности объединения $n$ событий. Независимость событий. Условная вероятность. Формула полной вероятности. Формула Байеса.			2					
10. Формулы Бернулли . Наиболее вероятное число успехов. Локальная и интегральная теоремы Муавра-Лапласа.			2					
11. Распределения случайных величин. Ряд и плотность распределения, их свойства. Примеры распределений: биномиальное, гипергеометрическое, Пуассона, равномерное, нормальное, экспоненциальное.			2					

12. Математическое ожидание и дисперсия и их свойства. Моменты. Коэффициент корреляции и его свойства.			2					
13. Нормальное, $\chi^2$ , Стьюдента, Фишера распределения			2					
<b>2. Модуль 2</b>								
1. Элементы математической статистики и ее приложения к обработке результатов наблюдений. Задачи математической статистики. Основные статистические задачи. Выборка. Выборочное (эмпирическое) распределение и выборочные характеристики: среднее, дисперсия, моменты. Вариационный ряд и эмпирическая функция распределения. Группировка наблюдений, гистограммы. Сходимость выборочных характеристик к истинным			2					
2. Понятие оценки неизвестного параметра. Состоятельные оценки. Несмещенные и асимптотически несмещенные оценки. Принцип подстановки и метод моментов. Асимптотически нормальные оценки. Доверительные интервалы (точные и асимптотические).			2					
3. Эмпирическая функция распределения. Оценка неизвестных параметров. Метод максимального правдоподобия. Доверительное оценивание неизвестных параметров. Нормальная модель с неизвестным средним и неизвестной дисперсией. Критерии эффективности.			2					



4. Гипотезы. Основные понятия теории проверки конечного числа гипотез: простые и сложные гипотезы, критерии (статистические решающие функции), вероятности ошибок $i$ -го рода. Проверка гипотез. Мощность критерия. Теорема Неймана – Пирсона. Критерии	2							
5. Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Метод наименьших квадратов. Элементы факторного анализа. Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ	2							
6. Вариационный ряд и эмпирическая функция распределения. Группировка наблюдений, гистограммы. Сходимость выборочных характеристик к истинным. Доверительные интервалы (точные и асимптотические). Критерии эффективности.			6					
7. Гипотезы. Теории проверки конечного числа гипотез: простые и сложные гипотезы, критерии (статистические решающие функции), вероятности ошибок $i$ -го рода. Проверка гипотез. Мощность критерия. Критерии			6					
8. Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Элементы факторного анализа.			6					
9. Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ.			4					

10. Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции, и решение задач, выдаваемых преподавателем на практических занятиях.							36	
11.								
Всего	36		36				36	

## **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **4.1 Печатные и электронные издания:**

1. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика: учебное пособие для бакалавров.; рекомендовано МО РФ(М.: Юрайт).
2. Крамер Г., Колмогоров А. Н. Математические методы статистики: перевод с английского(Москва: Мир).
3. Боровков А. А. Математическая статистика: монография(Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН).
4. Зубков А. М., Севастьянов Б. А., Чистяков В. П. Сборник задач по теории вероятностей: учебное пособие(Москва: Лань).
5. Чистяков В. П. Курс теории вероятностей: учебник(Санкт-Петербург: Лань).
6. Вентцель Е. С., Овчаров Л. А. Задачи и упражнения по теории вероятностей: учеб. пособие для студентов вузов(Москва: Высшая школа).
7. Тюрин Ю.Н., Макаров А. А. Анализ данных на компьютере: учебное пособие по направлениям "Математика", "Математика. Прикладная математика"(Москва: Форум).
8. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей: учебник для студентов вузов математических специальностей университетов(Москва: Эдиториал УРСС).
9. Кремер Н. Ш., Эриашвили Н. Д. Теория вероятностей и математическая статистика: учебник для вузов по экономическим специальностям (Москва: ЮНИТИ-ДАНА).
10. Боровков А. А. Теория вероятностей: учебное пособие для мат. и физ. спец. вузов(Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.).
11. Харченко Л. П., Ионин В. Г., Глинский В. В. Статистика: Учебник (Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М").

### **4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Statistica 6 – система статистического анализа данных, включающая набор аналитических процедур и методов.

### **4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.

2. 2.Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет.  
- Режим доступа: <http://znanium.com/>

3.

### **5 Фонд оценочных средств**

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

### **6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.