

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

Б1.О.02.01.06 МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Математические методы в химии

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

04.05.01.31 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
ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	
ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	
ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	
ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	
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	
ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	
ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности	
ОПК-5.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-5.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	

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
Контактная работа с преподавателем:	1,44 (52)	
занятия лекционного типа	0,94 (34)	
практические занятия	0,5 (18)	
Самостоятельная работа обучающихся:	1,56 (56)	
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
1. Модуль 1									
	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	2							
	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 — χ^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.			2					
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.			1					
13. Нормальное, χ^2 , Стьюдента, Фишера распределения			1					
2. Модуль 2								
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.			2					
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			2					
8. Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Элементы факторного анализа.			2					
9. Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ.			2					

10. Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции, и решение задач, выдаваемых преподавателем на практических занятиях.							56	
11.								
Всего	34		18				56	

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.