

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

Б.Н. Кузнецов

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В
ХИМИИ**

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

Направление подготовки /
специальность _____

Направленность
(профиль) _____

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.03.01 Химия профиль подготовки 04.03.01.32 Физическая химия

Программу
составили

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

ОПК-3:Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
--

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-5:Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности
--

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является базовой. Курсу «Математические методы в химии» предшествуют дисциплины «Математический анализ», «Численные методы» в результате изучения которой студенты приобретают необходимые знания для понимания основ теории вероятностей и математической статистики.

«Математические методы в химии» является необходимой

основой для курса «Планирование эксперимента» и для всех дисциплин, использующих экспериментальную работу для обработки полученных результатов

Математика. Математический анализ
Математика. Высшая алгебра
Математика. Теория вероятностей и математическая статистика

Планирование эксперимента
Химическая термодинамика
Научно-исследовательская работа
Химическая кинетика
Современные физико-химические методы анализа
Коллоидная химия
Экспериментальные методы химической термодинамики

1.5 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)	Семестр
		4
Общая трудоемкость дисциплины	3 (108)	3 (108)
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	2 (72)
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	1 (36)	1 (36)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1 (36)	1 (36)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Зачёт)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Модуль 1	26	14	0	0	
2	Модуль 2	10	22	0	36	
Всего		36	36	0	36	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Предмет теории вероятностей. Статистическая устойчивость. Операции над событиями. Вероятность, аксиомы вероятности. Классическое определение вероятности. Частотная интерпретация вероятности.	4	0	0
2	1	Элементы комбинаторики (число размещений, сочетаний и перестановок). Урновая схема. Выборки с возвращением и без возвращения.	4	0	0

3	1	Геометрические вероятности. Свойства вероятности: теоремы сложения, формулы для вероятности объединения n событий. Независимость событий. Условная вероятность. Формула полной вероятности. Формула Байеса	4	0	0
4	1	Схема независимых испытаний Формулы Бернулли . Наиболее вероятное число успехов. Локальная и интегральная теоремы Муавра-Лапласа	4	0	0
5	1	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	0	0
6	1	Независимость случайных величин. Числовые характеристики случайных величин. Математическое ожидание и дисперсия и их свойства. Моменты. Коэффициент корреляции и его свойства	4	0	0

7	1	Нормальное распределение. Распределения, связанные с нормальным — χ^2 , Стьюдента, Фишера.	4	0	0
8	2	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	0	0
9	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	0	0

10	2	Эмпирическая функция распределения. Оценка неизвестных параметров. Метод максимального правдоподобия. Доверительное оценивание неизвестных параметров. Нормальная модель с неизвестным средним и неизвестной дисперсией. Критерии эффективности.	2	0	0
11	2	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	0	0
12	2	Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Метод наименьших квадратов. Элементы факторного анализа. Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ	2	0	0
Всего			26	0	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	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	0	0
2	1	Геометрические вероятности. Свойства вероятности: теоремы сложения, формулы для вероятности объединения n событий. Независимость событий. Условная вероятность. Формула полной вероятности. Формула Байеса.	2	0	0
3	1	Формулы Бернулли . Наиболее вероятное число успехов. Локальная и интегральная теоремы Муавра-Лапласа.	2	0	0
4	1	Распределения случайных величин. Ряд и плотность распределения, их свойства. Примеры распределений: биномиальное, гипергеометрическое, Пуассона, равномерное, нормальное, экспоненциальное.	2	0	0
5	1	Математическое ожидание и дисперсия и их свойства. Моменты. Коэффициент корреляции и его свойства.	2	0	0
6	1	Нормальное, χ^2 , Стьюдента, Фишера распределения	2	0	0

7	2	Вариационный ряд и эмпирическая функция распределения. Группировка наблюдений, гистограммы. Сходимость выборочных характеристик к истинным. Доверительные интервалы (точные и асимптотические). Критерии эффективности.	6	0	0
8	2	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	0	0
9	2	Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Элементы факторного анализа.	6	0	0
10	2	Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ.	4	0	0
Всего			26	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Гмурман В.Е.	Теория вероятностей и математическая статистика: учебное пособие для бакалавров.; рекомендовано МО РФ	М.: Юрайт, 2013
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Крамер Г., Колмогоров А. Н.	Математические методы статистики: перевод с английского	Москва: Мир, 1975
Л2.2	Боровков А. А.	Математическая статистика: монография	Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, 1997
Л2.3	Зубков А. М., Севастьянов Б. А., Чистяков В. П.	Сборник задач по теории вероятностей: учебное пособие	Москва: Лань, 2009
Л2.4	Чистяков В. П.	Курс теории вероятностей: учебник	Санкт-Петербург: Лань, 2003
Л2.5	Вентцель Е. С., Овчаров Л. А.	Задачи и упражнения по теории вероятностей: учеб. пособие для студентов вузов	Москва: Высшая школа, 2006
Л2.6	Тюрин Ю.Н., Макаров А. А.	Анализ данных на компьютере: учебное пособие по направлениям "Математика", "Математика. Прикладная математика"	Москва: Форум, 2010
Л2.7	Гнеденко Б. В.	Курс теории вероятностей: учебник для студентов вузов математических специальностей университетов	Москва: Эдиториал УРСС, 2005
Л2.8	Кремер Н. Ш., Эриашвили Н. Д.	Теория вероятностей и математическая статистика: учебник для вузов по экономическим специальностям	Москва: ЮНИТИ-ДАНА, 2004
Л2.9	Боровков А. А.	Теория вероятностей: учебное пособие для мат. и физ. спец. вузов	Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986
Л2.10	Харченко Л. П., Ионин В. Г., Глинский В. В.	Статистика: Учебник	Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2008

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

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

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

1. Обработка результатов химического анализа математическими методами: учебно-методическое пособие / Сиб. федерал. ун-т ; сост. Ф.Н Томилин, Е.Ю. Танкевич, А.А. Кузубов, А.А. Шубин. - Красноярск : ИПК СФУ, 2011. - 43 с.

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

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

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	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.
9.2.2	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/
9.2.3	

10 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.