

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  
МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА  
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В  
ХИМИИ**

Дисциплина Б1.О.02.01.06 МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА  
Математические методы в химии

Направление подготовки /  
специальность

Направленность  
(профиль)

Форма обучения

Год набора

очная

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)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

---

04.05.01.31 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

<b>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</b>
--

<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>
--

<b>ОПК-5:Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</b>
---

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
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>3 (108)</b>	<b>3 (108)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,44 (52)</b>	<b>1,44 (52)</b>
занятия лекционного типа	0,94 (34)	0,94 (34)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>1,56 (56)</b>	<b>1,56 (56)</b>
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Зачёт)</b>		

### 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	24	10	0	0	
2	Модуль 2	10	8	0	56	
Всего		34	18	0	56	

#### 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	2	0	0
4	1	Схема независимых испытаний Формулы Бернулли . Наиболее вероятное число успехов. Локальная и интегральная теоремы Муавра-Лапласа	4	2	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	2	0

7	1	Нормальное распределение. Распределения, связанные с нормальным — $\chi^2$ , 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	2	0
Всего			24	6	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.	2	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.	1	0	0
6	1	Нормальное, $\chi^2$ , Стьюдента, Фишера распределения	1	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.	2	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	2	0	0
9	2	Элементы дисперсионного регрессионного и корреляционного анализа. Элементы факторного анализа.	2	0	0
10	2	Математическая обработка результатов с помощью современных вычислительных программ.	2	0	0
Всего			18	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: <a href="http://znanium.com/">http://znanium.com/</a>
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.