

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А. Маракаев
«19» мая 2023 г.

Рабочая программа
«Математические методы в химии»

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Направленность (профиль)
«Медицинская и фармацевтическая химия»

Форма обучения
очная

Программа одобрена
на заседании института
протокол № 7 от «17» апреля 2023 года

Программа одобрена
НМК факультета биологии и экологии
протокол № 8 от «28» апреля 2023 года

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины являются:

- овладение современными методами компьютерной статистической обработки данных в том числе и многомерных (например, результатов аналитических исследований: хроматографических, спектроскопических и др.);
- освоение хемометрических подходов для выделения полезной информации из большого массива информации, проведение классификации данных, а также предсказание параметров и свойств химических объектов и процессов;
- изучение методов планирования многофакторного эксперимента.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений. Шифр в соответствии с учебным планом Б1.В.07.

Подготовка студентов 3 курса направления «Медицинская и фармацевтическая химия», выполняемая в рамках изучения данного предмета, производится с целью теоретического и практического освоения современных методов компьютерной обработки химических данных.

Студенты получают представление об основах статистики, а также хемометрики - области науки, сочетающей в себе математический аппарат и специальные статистические методы, используемые при обработке многомерных данных - результатов химического анализа. Для обеспечения контроля успеваемости студентов в процессе обучения предусмотрено проведение тестирований, контрольных работ, опросов и коллоквиумов. Итоговой формой контроля является зачёт.

Полученные в курсе «Математические методы в химии» знания необходимы для изучения последующих общепрофессиональных и специальных дисциплин, а также для выполнения квалификационных работ.

Исходные требования, предъявляемые к студентам:

- знание основ описательной статистики (анализ выборки: расчет среднего, математического ожидания, дисперсии и т.д.),
- уверенное владение персональным компьютером (использование программ для обработки массивов данных, умение выполнять поиск научной литературы).

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
Профессиональные компетенции		
<p>ПК-1 Способен проводить НИР и НИОКР, выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.</p>	<p>ПК-1.5 Обрабатывает результаты экспериментальных и теоретических исследований.</p>	<p>Знать: – основные задачи статистики и хемометрики; – подходы к обработке данных, их преимущества и ограничения; – способы оценки результатов статистической и хемометрической обработки.</p> <p>Уметь: – выбирать подходящий способ предварительной обработки данных (центрирование, автошкалирование, взятие производной и т.д.) – выбирать подходящий метод статистической и хемометрической обработки данных; – оценивать результат применения того или иного статистического метода.</p> <p>Владеть навыками: – работы с программным обеспечением, реализующим способы предобработки данных, а также выводом описательной статистики; – работы с программным обеспечением реализующим методы статистической и хемометрической обработки данных.</p>
<p>ПК-8 Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции фармацевтического и химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции.</p>	<p>ПК-8.2 Обрабатывает результаты измерений.</p>	<p>Знать: – типы статистических данных; – особенности работы со спектральными данными; – подходы к статистической и хемометрической обработке данных, их преимущества и недостатки.</p> <p>Уметь: – планировать эксперимент, в том числе многофакторный; – приводить тот или иной тип данных в удобную или требуемую форму для последующей работы.</p> <p>Владеть навыками: – графического представления данных в том числе после их обработки; – работы с программным обеспечением, реализующим различные способы обработки данных.</p>

4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Основы статистики. Выборочные и генеральные параметры.	5			12				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Теория вероятностей при распределении признаков. Работа с номинативными переменными.	5			8				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Методы сравнения средних величин. Корреляционный анализ.	5			10				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Регрессионный анализ. Введение в метод главных компонент. Методы хемометрической классификации и кластерный анализ.	5			12				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Матричное представление данных. Методы хемометрической калибровки.	5			8				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
6	Способы обработки химических данных.	5			10				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
7	Методы компьютерного моделирования в химии	5			3				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	ИТОГО				63				

Содержание разделов дисциплины

1. Вводная лекция

- 1.1. Химические ограничения при решении математических задач.
- 1.2. Понятие хемометрики - области науки, изучающей математические методы исследования химических данных. Связь хемометрики с другими дисциплинами: аналитической химией, информатикой и статистической обработкой данных.
- 1.3. Основные принципы, задачи и основная идея хемометрики.
- 1.4. Понятие об измерении.

2. Основы статистики. Выборочные и генеральные параметры

- 2.1. Применение статистики в химии. Выборочные и генеральные параметры.
- 2.2. Способы представления данных.
- 2.3. Типы измерительных шкал.
- 2.4. Статистические гипотезы.
- 2.5. Меры среднего уровня и меры рассеяния.
- 2.6. Нормальный закон распределения. Критерий Колмогорова-Смирнова. Проверка выборочного распределения на нормальность.
- 2.7. Оценка однородности выборки.
- 2.8. Последовательность обработки результатов анализа. Составляющие точности измерений.
- 2.9. Погрешность и результат измерения. Способы учета и снижения погрешностей. Лабораторная работа. Построение вариационных рядов. Лабораторная работа. Расчет мер центральной тенденции и рассеяния для дискретных и непрерывных величин. Лабораторная работа. Проверка эмпирического распределения на нормальность с помощью критерия Колмогорова-Смирнова.

3. Теория вероятностей при распределении признаков. Работа с номинативными переменными.

- 3.1. Теория вероятностей и случайные события.
- 3.2. Номинативные переменные.
- 3.3. χ^2 -Критерий Пирсона. Распределение Пирсона. Поправка Йетса.
- 3.4. Точный тест Фишера. Лабораторная работа. Применение критерия χ^2 -Критерий Пирсона для работы с номинативными данными.

4. Методы сравнения средних величин. Корреляционный анализ

- 4.1. Способы сравнения одной, двух и более выборок между собой, применяемые критерии, формулировка гипотез и статистического вывода.
- 4.2. Корреляционный анализ. Задачи, виды взаимосвязей, условия применения, ограничения. Коэффициенты ковариации и корреляции. Лабораторная работа. Одновыборочные, двух выборочные и много выборочные сравнения. Апостериорные тесты. Лабораторная работа. Оценка направления и силы связи с помощью парной корреляции Пирсона.

5. Регрессионный анализ. Введение в метод главных компонент. Методы хемометрической классификации и кластерный анализ.

- 5.1. Сущность, определение и задачи регрессионного анализа. Зависимые и независимые переменные.
- 5.2. Простая линейная регрессия. Метод наименьших квадратов.
- 5.3. Оценка статистической значимости регрессионной модели. Оценка статистической значимости связи переменных Y и X. Коэффициент детерминации. Связь корреляционного и регрессионного анализа.
- 5.4. Введение в метод анализа главных компонент.
- 5.5. Основные методы хемометрической классификации.
- 5.6. Основы кластерного анализа. Лабораторная работа. Построение уравнения простой линейной регрессии и оценка значимости ее основных параметров. Лабораторная работа. Оценка вклада многомерных данных в формирование первой главной компоненты.

Лабораторная работа. Проведение хемометрической классификации растительных масел методом SIMCA на основе БИК-данных.

6. Матричное представление данных. Методы хемометрической калибровки.

6.1. Матричное представление в хемометрике.

6.2. Применение матричного представления в компьютерном моделировании химических объектов и процессов.

6.3. Рекомендации при построении графических зависимостей.

6.4. Основные методы хемометрической калибровки.

Лабораторная работа. Анализ графиков счетов и нагрузок МГК.

Лабораторная работа. Составление матрицы остатков МГК.

7. Способы обработки химических данных

7.1. Коррекция базовой линии. Нормализация. Интерполяция. Сглаживание

7.2. Центрирование, нормирование и автошкалирование данных. Назначение указанных процедур.

7.3. Применение 1-й и 2-й производной к спектральным данным.

7.4. SNV-коррекция.

7.5. MSC-коррекция

Лабораторная работа. Обработка спектральных данных.

Лабораторная работа. Обработка данных поверки дозирующих устройств гравиметрическим методом.

8. Основы планирования многофакторного эксперимента

8.1. Планирование эксперимента: определение, этапы, схема, факторы и отклики.

8.2. Описание отдельных этапов планирования эксперимента. Модель множественной линейной регрессии. Проверка однородности дисперсий и значимости коэффициентов множественной линейной регрессии.

8.3. Понятие оптимизации.

9. Методы компьютерного моделирования в химии

9.1. Понятие моделирования.

9.2. Методы статистического моделирования. Краткий обзор.

9.3. Методы, основанные на эмпирических потенциалах. Краткий обзор.

9.4. Методы квантово-химического моделирования. Краткий обзор.

9.5. Методы моделирования для дизайна и создания новых соединений с требуемыми свойствами. Краткий обзор.

Лабораторная работа. Моделирование траекторий электронного пучка в твердом веществе методом Монте-Карло.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – предназначена для начального ознакомления студентов с изучаемой дисциплиной, целями и задачами курса. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках изучения данной дисциплины, а также предлагается обзор рекомендуемой учебно-методической литературы.

Академическая лекция (лекция общего курса) – последовательное изложение учебного материала в соответствии с темой занятия. Как правило, проводится в виде

доклада, сопровождаемого иллюстрированной презентацией, содержащей информативную часть, примеры и пояснения к изучаемому материалу.

Лабораторное занятие – занятие, посвященное практическому освоению методов обработки данных, а также выступлению студентов с докладами по выбранным темам в формате мультимедийной презентации.

Консультации – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

Электронный учебный курс «Математические методы в химии» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- осуществляется проведение отдельных мероприятий текущего контроля успеваемости студентов;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлены правила прохождения промежуточной аттестации по дисциплине;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в режиме онлайн;
- представлена информация о формах синхронного и асинхронного взаимодействий между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

При осуществлении образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.
- надстройка Chemometrics Add-In для MS Excel;
- оболочка для статистического программирования R-studio.

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

В процессе осуществления образовательного процесса по дисциплине используются:

- автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» http://www.lib.uni Yar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php
- база спектральной информации «SpectraBase» <https://spectrabase.com/>

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Крамер Г. Математические методы статистики. / Г.Крамер; Пер.с англ - 2-е изд., стереотип. – М.: Мир, 1975. – 648 с.
http://www.lib.uni Yar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=332771&cat_cd=YARSU
2. Компьютерная химия: метод. указания для студентов, обучающихся по направлению Химия / сост. В.Ю. Орлов, А.Д. Котов, Д.А. Базлов, А.В. Цивов; Яросл. гос. ун-т. – Ярославль.: ЯрГУ, 2013. – 74 с. <http://www.lib.uni Yar.ac.ru/edocs/iuni/20130304.pdf>

б) дополнительная литература

1. Смагунова А.Н. Статистические методы в аналитической химии : учебное пособие для вузов / А.Н. Смагунова, О.М. Карпукова. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 364 с. <https://urait.ru/bcode/475168>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

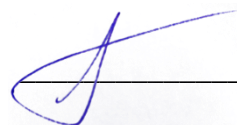
Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для лабораторных работ – списочному составу группы обучающихся.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются:

- для проведения лекционных занятий - аудитория, оборудованная для проведения лекций и консультаций (компьютер + мультимедиа-проектор);
- для проведения лабораторных занятий - компьютерный класс с доступом к сети Интернет;
- для получения необходимой учебной литературы - фонд библиотеки;
- сервер системы электронного университета «Moodle».

Автор:

Доцент института
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.



Лебедев А.С.

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Математические методы в химии»**

**Фонд оценочных средств
для проведения текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации студентов
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Темы рефератов

Подготовка реферата по одной из указанных тем:

1. Основные этапы развития хемометрики.
2. Основные принципы и подходы в хемометрике.
3. Хемометрика в науке и технике.
4. Перспективы развития хемометрики.
5. Применение математических методов в хемометрике.
6. Применение математических методов в аналитической химии.
7. Методы сопоставления и анализа спектральных данных.
8. Кластерный анализ и его применение в химии.
9. Логистическая регрессия и её применение в химии.
10. Ошибки первого и второго рода. Примеры и последствия.
11. Случайные величины, классификация. Параметры случайных величин и их оценки.
12. Определение основных статистик по выборке. Меры центральной тенденции и меры среднего уровня.
13. Прецизионность, правильность и точность. Соотношение понятий, способы расчета и оценки.
14. Оценка параметров случайных величин по выборке, точечное оценивание.
15. Различные виды распределений случайных величин. Нормальное распределение и распределения, основанные на нормальном.
16. Категории ошибок в химии. Погрешности измерения и причины их возникновения.
17. Вычисление относительных изменений величин и их погрешностей.
18. Метод наименьших квадратов. Ограничения и примеры использования.
19. Расчет погрешностей прямых измерений.
20. Расчет погрешностей косвенных измерений.
21. Сравнение двух процедур по методу наименьших квадратов для независимых и парных измерений. Корреляция и регрессия.
22. Метод главных компонент. Интерпретация результатов.
23. Расчет концентраций веществ с помощью методов хемометрической калибровки.
24. Методы многомерной калибровки. Методы MLR, PLS1, PLS2.
25. Влияние различных физико-химических факторов на результаты декомпозиции.
26. Примеры использования хемометрики для обработки данных спектроскопических измерений.
27. Методы SAR и QSAR – определение связи «структура-активность». Виртуальный скрининг. Возможности методов и перспективы применения.
28. Системы представления химических соединений: SMILES, SMARTS и др.
29. Методы статистического моделирования. Область применения в химии.

Образцы вопросов к Тестированию №1

1. Торсионный угол образуют четыре атома химического соединения. Верно ли данное утверждение?
А. Да
Б. Нет
2. Истинное значение измеряемой величины невозможно измерить абсолютно точно. Верно ли данное утверждение?
А. Да
Б. Нет
3. Случайная погрешность измерений всегда выше систематической. Верно ли данное утверждение?
А. Да
Б. Нет
4. Медианой называется значение, встречающееся в выборке наиболее часто. Верно ли данное утверждение?
А. Да
Б. Нет
5. Переведите 10 мг% в ppm. В ответе укажите только число, разделитель дроби – запятая.
6. Округлите значение погрешности 0.009491. В ответе укажите только число, разделитель дроби – точка.
7. Укажите количество значащих цифр в числе 32070. В ответе укажите только число.
8. Укажите количество верных (достоверных) цифр в числе 0.3729 ± 0.01
9. Эталон физической величины это ...
А. Мера для нахождения принятого опорного значения
Б. Мера для нахождения истинного значения
В. Высокоточная мера сравнения
Г. Один из способов измерений физической величины
10. Истинным значением называется ...
А. Абсолютно точное значение физической величины, существующее постоянно
Б. Абсолютно точное значение физической величины, существующее в конкретный момент времени и в определенных условиях +
В. Измеренное значение эталона физической величины
Г. Среднее значение, полученное по результатам многократных измерений
11. Шкала измерения pH при помощи индикаторной бумаги является шкалой ...
А. Наименований
Б. Порядка
В. Интервалов
Г. Отношений
12. Укажите наиболее часто использующуюся в статистике доверительную вероятность.
А. 0.95

- Б. 0.99
- В. 0.999
- Г. 0.05
- Д. 0.01
- Е. 0.001

13. Установите являются ли X_{\max} и X_{\min} грубыми погрешностями по критерию Граббса (G) при $P = 0.95$. Имеется набор данных измерений 12.2, 13.0, 12.3, 14.9; 13.2. Ниже приведены критические значения критерия Граббса.

- А. X_{\max} – грубая погрешность
- Б. X_{\min} – грубая погрешность
- В. Оба значения являются промахами
- Г. Ни одно из значений промахом не является

14. Рассчитайте предел повторяемости (r) исходя из следующих данных. $X_1 = 22.25$, $X_2 = 26.13$, S^2 (дисперсия) = 2.40. Ответ округлите до трех значащих цифр.

15. Округлите выборочное среднее 3.63809157 с учетом того, что погрешность измерения составила 0.22901 (погрешность тоже необходимо округлить). Ответ запишите в числовом виде.

Образцы вопросов к Тестированию №2

1. Непараметрические критерии оперируют частотами и рангами. Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет

2. Выпадение ненулевого числа очков при бросании игрального кубика является случайным событием. Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет

3. t-Критерий Стьюдента является параметрическим критерием. Верно ли данное утверждение?

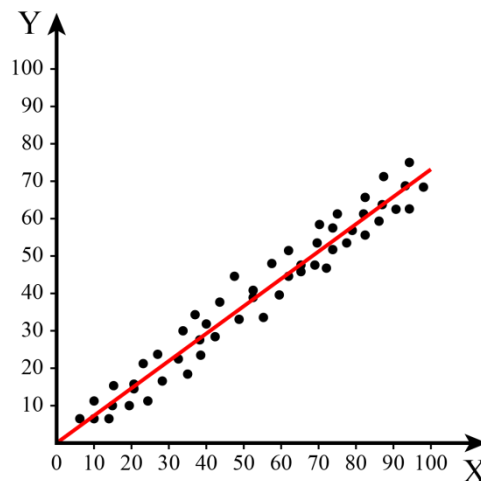
- А. Да
- Б. Нет

4. Дисперсионный анализ позволяет не только определить наличие / отсутствие различий между выборками (например, четырьмя), но и показать между какими конкретными выборками имеются различия (например, между первой и третьей). Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет

5. На рисунке ниже изображен пример гомоскедастичной вариативности. Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет



6. Каково минимальное количество точек для построения корреляционного поля.
7. В регрессионном анализе переменная Y является независимой переменной. Верно ли данное утверждение?
 А. Да
 Б. Нет
8. Событие А – снижение концентрации реагентов, событие Б – увеличение концентрации продуктов одной и той же химической реакции. Следовательно, события А и Б являются ...
 А. Совместными
 Б. Несовместными
 В. Равновозможными
 Г. Противоположными
9. В регрессионном анализе понятию фактор соответствует ... (ответов может быть несколько)
 А. Предиктор
 Б. Отклик
 В. Независимая переменная
 Г. Зависимая переменная
 Д. Коэффициент регрессии
 Е. Свободный член регрессии
10. Уравнение типа $Y = b_1X_1 + b_2X_2 + a$ является моделью ... регрессии
 А. Простой линейной
 Б. Сложной линейной
 В. Множественной линейной
 Г. Квадратичной
 Д. Экспоненциальной
11. Укажите синоним, соответствующий значению «линейная регрессионная модель» (ответов может быть несколько)
 А. Линейная аппроксимация
 Б. Средняя линия
 В. Тренд линейной зависимости
 Г. Линия наименьших квадратов
 Д. Главная компонента

12. На регрессионной прямой калибровки методики (инструментальный метод анализа) коэффициент интерсепт обычно характеризует ... (ответов может быть несколько)
- А. Дрейф базовой линии
 - Б. Систематическую погрешность измерений
 - В. Фоновый сигнал
 - Г. Уровень шума
 - Д. Выбросы
13. Основная задача метода главных компонент заключается в...
- А. Приведении данных к более удобному графическому представлению
 - Б. Сокращению числа откликов для лучшего прогнозирования
 - В. Снижении размерности данных и числа предикторов +
 - Г. Увеличении точности предсказания будущих значений зависимой переменной
 - Д. Уменьшению погрешности измерений
14. t-Распределение при увеличении числа измерений стремится к нормальному. Верно ли данное утверждение?
- А. Да
 - Б. Нет
15. Укажите критерии, которым свойственно асимметричное распределение при малом объеме выборки ... (ответов может быть несколько)
- А. Двусторонний t-критерий
 - Б. Односторонний t-критерий
 - В. F-критерий Фишера
 - Г. хи-квадрат критерий Пирсона
 - Д. Коэффициент корреляции Пирсона

Образцы вопросов к Тестированию №3

1. Укажите элемент матрицы a_{32} . В ответе укажите только число.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & -1 & 6 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix}$$

2. Указанная ниже матрица является квадратной. Верно ли данное утверждение?

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 6 & 10 \\ 2 & 3 & 4 & 7 & 11 \\ 3 & 4 & 5 & 8 & 12 \\ 4 & 5 & 6 & 9 & 13 \end{pmatrix}$$

- А. Да
- Б. Нет

3. В квадратной матрице число строк всегда равно числу столбцов. Верно ли данное утверждение?

- А. Да

Б. Нет

4. Укажите порядок матрицы. В ответе укажите только число.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \\ 8 & 9 & 10 & 11 \\ 12 & 13 & 14 & 15 \end{pmatrix}$$

5. Транспонируйте матрицу, в ответе укажите элемент a_{23} .

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & -1 & 6 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 3 & -1 & 8 \\ 5 & 6 & 7 \end{pmatrix}$$

6. Чему равен определитель матрицы A?

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$$

7. Чему равен определитель матрицы A?

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 4 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

8. Сложив матрицы A и B получают матрицу C. В ответе укажите элемент c_{13}

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ -3 & 1 & 8 \\ 10 & 4 & 3 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 5 & 1 & -2 \\ 2 & -1 & 8 \\ 9 & 4 & 3 \end{pmatrix}$$

9. Перемножив матрицы A и B получают матрицу C. В ответе укажите элемент c_{21} .

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

10. Спектрофотометрический анализ продукта синтеза является примером пассивного эксперимента. Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет

11. В конечном счете, многофакторный (полный факторный) эксперимент использует математический аппарат множественной регрессии. Верно ли данное утверждение?

- А. Да
- Б. Нет

12. Построение функции, усредняющей значения набора точек, называется ...
Ответ: аппроксимация

13. Проверка однородности дисперсий при проведении многофакторного (полного факторного) эксперимента обычно проводится по ... (ответов может быть несколько)

- А. t-критерию Стьюдента
- Б. F-критерию Фишера
- В. Точному тесту Фишера
- Г. хи-Квадрат критерию Пирсона
- Д. U-критерию Манна-Уитни
- Е. G-критерию Кохрена

14. Опишите тип модели «электронный график кинетики химической реакции» (ответов может быть несколько)...

- А. Статическая
- Б. Динамическая
- В. Материальная
- Г. Информационная

15. Согласно простому адиабатическому приближению в молекулярных системах описывается...

- А. Только движение ядер
- Б. Только движение электронов
- В. Совместное движение как электронов, так и нуклонов
- Г. Многоэлектронная волновая функция как общая электронная плотность

16. Какой из методов КХМ является наиболее времязатратным при расчете одной и той же молекулярной системы?

- А. Метод молекулярной динамики
- Б. Метод теории функционала плотности
- В. Метод Монте-Карло
- Г. Метод броуновской динамики
- Е. Метод Хартри-Фока

Задания для самостоятельной работы

(данные задания выполняются студентом самостоятельно и преподавателем в обязательном порядке не проверяются)

Примеры заданий для самостоятельной работы по теме 2

Задание 1. Имеется следующий массив данных: 23.2, 24.8, 22.3, 25.0; 24.4, 25.5. При помощи средств MS Excel вычислить выборочное среднее, дисперсию, стандартное отклонение.

Задание 2. Вычислите среднее взвешенное значение, моду и медиану в дискретном ряду. Представьте результаты в графическом виде.

X	4	5	6	7	8	9	10	12	14
f	1	3	10	6	6	5	2	3	1

Задание 3. Вычислите среднее значение, моду и медиану в массиве данных:

4; 4; 3; 5; 6; 6; 8; 7; 7; 8; 9; 7; 8; 7; 9; 7; 10

Представьте результаты в графическом виде.

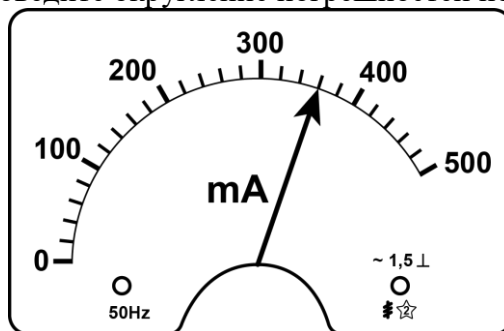
Задание 4. Вычислите среднее взвешенное значение, моду и медиану в интервальном ряду.

Начало интервала	Конец интервала	Частота
101	200	20
201	300	50
301	400	60
401	500	40
501	600	25

Задание 5. При помощи метода ВЭЖХ определили содержание сорбиновой кислоты в кетчупе. Получили следующие результаты: 155,1; 150,8; 149,5; 151,9; 151,2 мг/л. При помощи Q-критерия, критерия Граббса и правила 3-х сигм оценить наличие промахов в выборке ($P=0.95$). Рассчитайте предел повторяемости для нескорректированной (без удаления возможных выбросов) выборки и оцените приемлемость выборочного среднего (по пределу повторяемости), если стандартное отклонение, вычисленное в независимом опыте, составило 2,09.

Задание 6. Имеются данные измерений температуры плавления соединения: 188,1; 187,4; 187,9; 188,3 °C. Найдите стандартную ошибку среднего (SE) и случайную погрешность. При помощи критерия Граббса оцените наличие выбросов в выборке, рассчитайте предел повторяемости ($S = 0,39$) и оцените приемлемость выборочного среднего (по пределу повторяемости).

Задание 7. Найдите приборную погрешность (абсолютную и относительную) измерения по изображению ниже. Проведите округление погрешностей по известным правилам.



Задание 8. Провести округление следующих значений погрешностей и средних. Ответ записать в виде $(X_{cp} \pm \Delta x)$

Среднее значение, X_{cp}	Значение погрешности, Δx	Ответ $(X_{cp} \pm \Delta x)$
203.35	4.38	
28.94	0.2936	
35.5	0.0349	
35.45	1.3820	
0.4682	0.0592	

3567.8928	8.5630	
-----------	--------	--

Примеры заданий для самостоятельной работы по теме 3

Задание 1. Студент выучил на зачет по предмету «Математические методы в химии» 30 вопросов из 40 возможных. Какова вероятность того, что студент ответит на все вопросы из билета, если в билете содержится 3 вопроса? Какова вероятность того, что студент не ответит ни на один вопрос?

Задание 2. Прибор включает 2000 элементов, работающих независимо один от другого. Вероятность отказа любого из элементов в течении времени X равна 0.003. Найти вероятность того, что за время X откажут ровно 4 элемента.

Задание 3. Упаковки для фармацевтического производства содержат 0.5 % брака. Найти вероятность того, что среди 20 взятых наугад изделий нет ни одного испорченного.

Задание 4. Выберите нужный критерий, чтобы обработать данные в таблице:

	Подействовало	Не подействовало
Лекарство А	5	1
Лекарство Б	2	4

Достоверно ли отличается эффективность лекарства А от лекарства Б ($P=0.99$)?

Задание 5. Оцените при помощи критерия χ^2 -Пирсона с поправкой Йетса (и без нее) достоверно ли отличаются друг от друга выборки ($P=0.95$).

	Подействовало	Не подействовало
Лекарство А	16	6
Лекарство Б	11	9

Примеры заданий для самостоятельной работы по теме 4

Задание 1. Методом Монте-Карло было найдено значение числа π ($n = 101$) равное 3.122 ± 0.031 . Оцените достоверность данного результата.

Задание 2. Оцените при помощи t-критерия Стьюдента ($P = 0.95$) различаются ли данные определения магния в минеральной воде, полученные двумя разными методами.

Номер измерения	Метод 1	Метод 2
1	23.5	22.5
2	24.1	21.2
3	25.3	21.7
4	23.8	22.2
5	24.2	21.8

Задание 3. При помощи ANOVA выясните достоверно ли отличаются выборки

Номер измерения	Метод 1	Метод 2	Метод 3
1	23.5	24.1	23.2
2	24.1	23.5	24.5
3	25.3	23.2	24.1
4	23.8	24.3	23.9
5	24.2	23.1	24.0

Задание 4. Выясните направление и силу связи переменных в таблице. Рассчитайте стандартную ошибку коэффициента корреляции. Определите достоверно ли значение полученного коэффициента корреляции.

Измерение	Выход продукта	Концентрация субстрата
1	54	42
2	63	35
3	69	24
4	73	13
5	88	4

Примеры заданий для самостоятельной работы по теме 5

Задание 1. Калибровочный график фенола был построен по стандартным растворам с концентрациями 0.05, 0.10, 0.20, 0.30 и 0.50 мг/л. ВЭЖХ-анализ показал, что площади пиков стандартных растворов будут равны соответственно 35, 72, 143, 212 и 358. Из отходов лакокрасочных производств была отобрана проба массой 1 г. и растворена в 1000 мл воды. После полученный раствор подвергся хроматографическому анализу, который показал наличие сигнала фенола площадью 182.

Задачи:

1. Определить содержание фенола в отходах;
2. Рассчитать коэффициенты корреляции и детерминации;
3. Определить достоверность полученных коэффициентов линейной регрессии и провести тест на адекватность модели.

Примеры заданий для самостоятельной работы по теме 6

Задание 1. Найдите определитель матриц

$$1. A = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \quad 2. B = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \quad 3. C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Задание 2. Проведите транспонирование матриц

$$1. A = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \quad 2. B = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 3 \\ 7 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad 3. C = \begin{pmatrix} 2 & 7 \\ 3 & 8 \\ 5 & 0 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$$

Задание 3. Сложите и вычтите матрицы A и B (A+B; A-B)

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$$

Задание 4. Найдите произведения

$$1. A = 4 * \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$2. B = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

Критерии оценивания результатов текущего контроля успеваемости

Форма текущего контроля успеваемости	Правила выставления оценки
Самостоятельная работа	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если задание выполнено полностью. - <i>Хорошо</i> выставляется, если задание выполнено полностью с незначительными ошибками. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся приступил к выполнению задания, наметил алгоритм решения, но допустил серьезные ошибки на этапах решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не приступал к выполнению задания или не смог выработать алгоритм его решения.
Опрос	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос с включением в содержание ответа рассказа (лекции) преподавателя, материалов учебников, дополнительной литературы без наводящих вопросов. - <i>Хорошо</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос в объеме рассказа (лекции) преподавателя с включением в содержание ответа материалов учебников с четкими положительными ответами на наводящие вопросы преподавателя. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено более половины требуемого материала, с положительным ответом на большую часть наводящих вопросов. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено менее половины требуемого материала или не озвучено главное в содержании вопроса с отрицательными ответами на наводящие вопросы, или обучающийся отказался от ответа без предварительного объяснения уважительных причин.
Тест	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется за 85% правильных ответов и более. - <i>Хорошо</i> выставляется за 65% правильных ответов и более. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется за 50% правильных ответов и более. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется при наличии менее 50% правильных ответов или при отказе обучающегося пройти тестовый контроль.
Практическая работа	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся имеет глубокие знания учебного материала по теме практической работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий,

	<p>используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме практической работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Обучающийся демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме практической работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом освоил материал практической работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы, обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется обучающемуся, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала практической работы, который полностью не раскрыл.</p>
Реферат	<p>- <i>Отлично</i> выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, подготовлен кратко, научно, логично, в дискуссии по реферату обучающийся может ответить на все вопросы оппонентов.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся ответил на часть вопросов оппонентов.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, либо доклад отсутствует, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов, либо отказался участвовать в дискуссии, реферат отсутствует.</p>

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету:

1. Ограничения химических наук в решении задач по средствам математического аппарата.
2. Как можно описать химическое соединение с позиций математики.

3. Что такое хемометрика? Её задачи, примеры применения.
4. Классификация типов химического анализа. Качественный и количественный химический анализ. Методы идентификации аналитов в простых и сложных матрицах. Перевод единиц измерения.
5. Классификация химического анализа по уровню сложности анализируемой структуры. Примеры.
6. Правила работы на аналитических весах. Классы аналитических весов и характеристики на которых базируется разделение на классы.
7. Принципы поверки пипет-дозаторов. Ошибка повторяемости и расчет погрешности. Типы дозирующих устройств.
8. Теория измерений. Прямые и косвенные измерения. Основные постулаты теории измерений. Понятие эталона физической величины. Что может использоваться в качестве принятого опорного значения?
9. Типы данных в статистике. Примеры. Понятие кодирования.
10. Типы измерительных шкал. Примеры.
11. Понятие выборки и генеральной совокупности. Типы выборок. Отбор проб. Характеристики выборки и генеральной совокупности.
12. Способы представления статистических данных: вариационный ряд (дискретный и интервальный), статистические таблицы, статистические графики. Понятие ранжирования, назначение. Частоты и накопленные частоты.
13. Понятие значащих, достоверных и сомнительных цифр. Правила округления выборочных значений.
14. Статистические гипотезы. Нулевая и альтернативная гипотезы. Ошибки 1-го и 2-го рода, примеры.
15. Способы принятия и отвержения гипотез. Статистические критерии и p-value. Формулировка заключений по результатам статистической оценки.
16. Описательная статистика. Назначение, применение. Точечные и интервальные оценки.
17. Меры среднего уровня, расчет показателей. Структурные средние. Свойства среднего.
18. Меры изменчивости, расчет показателей. Свойства дисперсии и стандартного отклонения. Применение описательной статистики в научных журналах.
19. Основные этапы проведения химического анализа. Порядок обработки результатов анализа.
20. Нормальное распределение и его свойства. Способы проверки распределения на нормальность.
21. Что такое промахи? Способы оценки промахов: правило 3-х сигм, Q-критерий, G-критерий Граббса. Какие вычислительные принципы лежат в их основе. Формулировка H_0 при оценке промахов.
22. Точность химического анализа. Составляющие точности: правильность и прецизионность.
23. Прецизионность в условиях повторяемости и воспроизводимости. Внутрилабораторная воспроизводимость. Расчет пределов повторяемости и воспроизводимости, значение.
24. Погрешность измерений. Абсолютная и относительная погрешность. Типы погрешностей по источнику возникновения. Способ оценки случайной погрешности.
25. Систематическая погрешность, причины возникновения. Способы оценки приборной погрешности. Класс точности приборов.
26. Правила округления погрешностей. Расчет суммарной погрешности измерений.
27. Классификация событий в теории вероятностей. Совместные и несовместные события.

28. Подходы к определению вероятности случайного события. Аксиомы теории вероятностей.
29. Параметрические и непараметрические критерии. Примеры.
30. хи-Квадрат критерий Пирсона. Область применения, условия применения. Таблицы сопряженности. Поправка Йетса, условия использования. Свойства распределения хи-квадрат.
31. Точный тест Фишера. Особенности, условия применения.
32. t-Критерий Стьюдента. Виды критерия, условия применения. Характеристики t-распределения. Зависимые и независимые выборки. Ограничения t-теста.
33. Дисперсионный анализ. Назначение, условия применения. Факторные и резульативные признаки. Виды дисперсионного анализа. F-распределение. Проблема множественных попарных сравнений.
34. Корреляционный анализ. Параметрическая корреляция (коэффициент корреляции Пирсона). Область применения, назначение, ограничения в интерпретации и применимости. Примеры применения в химии.
35. Диаграмма рассеяния. Прямая и обратная связь, сила связи. Коэффициент ковариации.
36. Регрессионный анализ. Связь с корреляционным анализом. Предикторы и отклики. Примеры применения регрессионного анализа в химии. Условия применения уравнения простой линейной регрессии.
37. Метод наименьших квадратов, как способ построения линейной регрессионной модели. Линейные и нелинейные модели регрессии. Множественная регрессия.
38. Задачи интерполяции и экстраполяции. Калибровочный график. Примеры графических зависимостей в химии и инструментальном анализе.
39. Коэффициенты уравнения простой регрессии. Способы расчета: статистический и графический. Расчет величин откликов.
40. Общая, остаточная и факторная дисперсия в регрессионном анализе. Коэффициент детерминации, интерпретация. Связь с корреляционным анализом.
41. Метод главных компонент. Задачи и назначение. Проблема мультиколлинеарности. График биplot. Ограничения метода, матричное представление. Матрицы счетов, нагрузок, остатков. Их анализ и интерпретация.
42. Формальное независимое моделирование аналогий классов (SIMCA): назначение, особенности метода. Задачи классификации и дискриминации.
43. Метод PLS-DA, как метод хемометрической классификации. Основы кластерного анализа.
44. Матрицы. Понятие, классификация. Применение. Смысл нахождения определителя для матриц 2-го и 3-го порядка. Вектор-строка и вектор-столбец.
45. Методы хемометрической калибровки: множественная линейная регрессия, регрессия на главные компоненты (PCR), регрессия на латентные структуры (PLS1, PLS2), регрессия методом опорных векторов (VSM-regression).
46. Многофакторный эксперимент. Активный и пассивный эксперимент. Задачи многофакторного анализа. Этапы проведения активного эксперимента. Матрица планирования эксперимента.
47. Принцип черного ящика, типы факторов. Оптимизация, типы. Критерии оптимальности.
48. Матрица планирования эксперимента и её свойства: симметричность, нормированность, ортогональность, ротатабельность. Множественная линейная регрессия. Расчет интерсепта и слоупа в полном факторном эксперименте.
49. Компьютерное моделирование в химии: основы, задачи. Модели и моделирование. Прямая и обратная задача КХМ.
50. Методы статистического моделирования.
51. Методы основанные на эмпирических потенциалах.

52. Методы квантовой химии. Применимость методов к различным химическим моделям.
53. Методы моделирования, применяемые для направленного дизайна химических соединений с нужными свойствами.
54. Критерий Колмогорова-Смирнова: назначение, виды, порядок расчета.

Оценка устного ответа на зачете

Устный ответ на зачете оценивается по 2 балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;
- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание студентом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Математические методы в химии»

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Математические методы в химии» являются лекции. По большинству тем предусмотрены лабораторные занятия, на которых студенты-химики осваивают специальные статистические методы, используемые при обработке данных, в том числе и многомерных. По определенным группам тем предусмотрено проведение контрольных тестирований в системе ЭОС Moodle.

Для успешного и полного освоения курса обязательным является посещение всех лекций, а также выполнение всех заданий на лабораторных работах, решение задач для самостоятельной работы и прохождение тестов для самопроверки (самоконтроля). Выполнение практических задач на лабораторных работах служит для закрепления изученного лекционного материала и усвоения рассматриваемых тем и разделов.

Самостоятельная работа студентов (при учебной необходимости) предполагает выступление с докладом по выбранной теме. Это позволит каждому из обучающихся выступить в качестве докладчика и отработать навыки предоставления материала перед аудиторией. Закрепление имеющегося материала достигается также через прохождение пробных электронных тестов в системе ЭОС Moodle и решения домашних заданий.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала, приобретенных практических навыков работы, в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде опросов и контрольных тестирований, в том числе на умение решать поставленные статистические задачи.

Завершающей формой контроля по данной дисциплине является зачет, подготовка к которому должна осуществляться преимущественно с использованием материалов лекций, находящихся в свободном доступе на платформе Moodle, лабораторных работ а также учебной литературы, указанной в разделе 8.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

Для самостоятельной работы студентов рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной программы.

Также для подбора учебной литературы рекомендуется использовать ряд интернет-ресурсов:

1. http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.
2. <https://urait.ru> Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика)
3. <http://window.edu.ru/catalog> Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам": свободный доступ к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.