

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
**Современные математические методы в физико-химическом
эксперименте**

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Коллоидная химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-3.С. Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области коллоидной химии	СПК-3.С.1 Грамотно обрабатывает результаты эксперимента в области коллоидной химии с использованием современной вычислительной техники	Знать: основные принципы и требования к обработке результатов химических и физико-химических экспериментов Уметь: Обосновано выбирать модели для обработки результатов эксперимента, оценивать возможные источники ошибок при интерпретации полученных экспериментальных результатов Владеть: навыками статистической обработки экспериментальных данных

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов занятия семинарского типа, 4 часа – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основы линейной алгебры и математической статистики, основы коллоидной химии

Уметь: формулировать задачи обработки экспериментальной информации

Владеть: базовыми приемами анализа экспериментальных данных

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)	Самостоятельная работа

форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		давателем), часы из них					та обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1.	9	2	2		1		5	4		4
Тема 2.	8	2	2				4	4		4
Тема 3.	7	2	2		1		5	2		2
Тема 4.	8	2	2				4	4		4
Тема 5.	12	3	3		1	1	8	4		4
Тема 6.	11	3	3			1	7	4		4
Тема 7.	9	2	2		1		5	4		4
Тема 8.	8	2	2				4	4		4
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>										
Итого	72	18	18		4	2	42	30		30

Содержание разделов:

- Тема 1. Введение в математические методы обработки данных. Эксперимент как предмет исследования. Понятие измерения. Непрерывные и дискретные измерения. Ошибки измерений и их оценка. Понятие модели данных.
- Тема 2. Статистический анализ результатов измерений. Систематические и случайные погрешности. Оценка достоверности результатов измерений. Методы планирования эксперимента
- Тема 3. Временные ряды и стохастические процессы. Цепи Гаусса-Маркова. Стохастические процессы как модель наблюдаемой величины. Определение параметров процесса из результатов измерений.
- Тема 4. Регрессионный анализ. Метод наименьших квадратов. Линейный МНК. Применение сингулярного и других видов разложений в решении задач метода наименьших квадратов.
- Тема 5. Нелинейный МНК. Оценка качества выбора модели, качества решения и параметров модели. Глобальная и локальная оптимизация. Методы оптимизации. Практическое применение.
- Тема 6. Снижение размерности данных. Факторизация. Метод главных компонент. Практические применения метода в спектроскопических задачах.
- Тема 7. Дифференцирование дискретных величин. Постановка задачи и важность проблемы для химических измерений. Проблема роста шумов при дифференцировании. Сравнительный анализ методов дискретного дифференцирования.
- Тема 8. Визуализация данных большой факторной размерности. Понятие подпространства, проекция данных на подпространства. Нахождение подпространств максимальной информативности

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Конспекты лекций, презентации лекций, основная и дополнительная литература.

Вопросы для домашних заданий.

1. Построить зависимость функционала суммы квадратов отклонений от отклонения параметров A и b для уравнения Шишковского ($\Delta\sigma = b \cdot \ln(Ac + 1)$) для заданного набора концентраций. Определить кривизну этой поверхности в области минимума в зависимости от диапазона исследуемых концентраций.
2. Написать программу (MATLAB, GNU Octave) для нахождения методом наименьших квадратов оптимального значения параметров уравнения Шишковского ($\Delta\sigma = b \cdot \ln(Ac + 1)$) из заданного набора экспериментально определённых значений $\{\Delta\sigma, c\}$. Программа должна рассчитывать также матрицу ковариации для полученных параметров и доверительные интервалы этих параметров.

3. Написать программу (MATLAB, GNU Octave) для разложения матрицы спектральных данных (полученной в собственной научной работе или по указанию преподавателя) по методу главных компонент. Определить число главных компонент.
4. Провести анализ разложения набора спектров поглощения органического красителя, образующего окрашенный комплекс с металлом, полученного при варьировании концентрации металла в растворе. При анализе использовать закон действующих масс. Написанная программа должна определять константу равновесия образования комплекса и спектры поглощения комплекса и красителя.
5. Написать программу для получения распределения частиц по размерам, используя зависимость веса осадка от времени оседания. При написании программы применить различные методы численного дифференцирования и сравнить качество получаемых результатов.
6. Написать программу и проанализировать данные многопараметрической (более 5) проточной флуоресцентной цитометрии (файл с исходными данными выдаётся преподавателем). Определить оптимальные классификационные векторы и предложить модель визуализации результатов анализа.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Конспекты лекций
2. Презентации лекций
3. Кобзарь А. И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. - 816 с.
4. Л. М. Батунер, М. Е. Позин, Математические методы в химической технике. Изд-во «Химия», Л. 1971. 824 стр.
5. Айвазян С. А., Бухштабер В. М., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности.— М.: Финансы и статистика, 1989.— 607 с.

Дополнительная литература

1. Jolliffe I.T. Principal Component Analysis, Series: Springer Series in Statistics, 2nd ed., Springer, NY, 2002, XXIX, 487 p. 28 illus. ISBN 978-0-387-95442-4

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: н.сотр. Вадим Александрович Тимошенко

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы для зачета:

1. Понятие “измерение”. Свойства измерения.
2. Виды ошибок измерения. Основные подходы к борьбе с ошибками измерений.
3. Дискретность измерений. Теорема Котельникова
4. Случайные величины. Виды распределений случайных величин. Физические эквиваленты различных видов распределений.
5. Случайные процессы. Корреляционная функция. Энергетический спектр случайного процесса.
6. Линейное предсказание. Предсказание вперёд. Сравнение с полиномиальной экстраполяцией.
7. Регрессионный анализ. Линейный МНК. Статистические свойства. Условия применения.
8. Понятие факторизация. Объекты факторизации. Неоднозначность факторизации.
9. Разложение по собственным числам и сингулярное разложение. Определение числа главных компонент.
10. Решение недоопределённых систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Вычисление псевдообратной матрицы.
11. Метод главных компонент. Применимость.
12. Практические применения метода главных компонент в химии. Примеры.
13. Оптимизация. Одномерная и многомерная оптимизация.
14. Локальная минимизация. Симплекс методы. Метод Ньютона.
15. Глобальная минимизация. Основные подходы.
16. Дискретное дифференцирование. Постановка задачи. Методы решения и их ограничения.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: основные принципы и требования к обработке результатов химических и физико-химических экспериментов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь: обосновано выбирать модели для обработки результатов эксперимента, оценивать возможные источники ошибок при интерпретации полученных экспериментальных результатов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть: навыками статистической обработки экспериментальных данных	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете