Математические методы в химии

Тематика практических занятий (семинаров)

Таблица 4а

№ ПЗ	№ раздела (темы)	Виды и содержание практической работы
ПЗ1.	Тема 1.	Оценки случайных величин. Параметры случайных величин
ПЗ2.	Тема 2.	Задачи математической статистики
ПЗ 3.	Тема 3.	Теоретические распределения случайных величин
ПЗ 4	Тема 3.	Градуировка. Погрешности.
ПЗ 5	Тема 4.	Дисперсионный анализ. Регрессионный анализ. Корреляционный анализ. Кластерный анализ
ПЗ 6	Тема 5.	Метод Монте-Карло
ПЗ 7	Тема 6.	Планирование эксперимента
ПЗ 8	Тема 7.	Численные методы
ПЗ 9	Тема 8.	Линейное программирование

Виды самостоятельной работы студентов – Решение задач по теме семинаров

Организация самостоятельной работы

Самостоятельная работа студентов предполагается в виде:

• изучения отдельных вопросов тематического плана дисциплины;

• подготовка сообщений по проблемным задачам предмета с привлечением знаний, полученных из теоретического лекционного курса и
рекомендованной учебной литературы;

• подготовка к практическим занятиям;

• выполнение работы по индивидуальному заданию

• подготовка к зачету

Вопросы к экзамену «Мат. методы в химии»

1. Линейные обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами: однородные.
2. Линейные обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами: неоднородные.
3. Основная проблема математической статистики. Оценка экспериментальных данных. Нормальное (гауссово) распределение. Нормированное гауссово распределение.
4. Генеральная и выборочная совокупности. Оценка статистических параметров для выборочной совокупности.
5. Доверительная оценка среднего.
6. Доверительная вероятность единичного результата выборки.
7. Выбраковка результатов экспериментов.
8. Расчет необходимого числа параллельных измерений.
9. Сравнение средних двух выборок методом средневзвешенного стандарта.
10. Сравнение средних двух выборок методом парного t-теста.
11. Правила округления.
12. Сравнение дисперсий, *F*-распределение Фишера
13. Статистический критерий согласия. χ^2 -распределение
14. Распределение Пуассона. Его среднее и дисперсия.
15. Гамма-распределение. Его среднее и дисперсия.
16. Эмпирический линейный коэффициент парной корреляции и его определение.
17. Регрессионный анализ. Метод наименьших квадратов.
18. Разыгрывание дискретной случайной величины. Разыгрывание полной группы событий.
19. Группировка объектов методов вычисления расстояний и объединения объектов в кластер. Построение дендрограмм.
20. Цепные вероятности. Цепь Маркова. Схема цепи Маркова.
21. Оценка надежности простейших систем методом Монте-Карло.

Подготовка задач

1.1. Найти вероятность того, что при бросании трех игральных костей шестерка выпадет на одной (безразлично какой) кости, если на гранях двух других костей выпадут числа очков, не равные 6.

Решение. Общее число элементарных исходов C^3_6 = (6.5.4)/(1.2.3) = 20 Если выпала 6, то число исходов, когда на 2 костях выпадают любые числа, но не 6 равно C^2_5.= (5.4)/(1.2) = 10. Тогда вероятность искомого события равна ½.

Ответ. ½.

1.2. В коробке шесть одинаковых, занумерованных шариков. Наудачу по одному извлекают все шарики. Найти вероятность того, что номера извлеченных шариков появятся в возрастающем порядке.

Ответ.1/720.

2.1.На отрезке *OA* длины *L* числовой оси *Ox* наудачу поставлены две точки: *B(x)* и *C(y),* причем *y≥x*. (Координата точки *C* для удобства дальнейшего изложения обозначена через *y)*. Найти вероятность того, что длина отрезка *BC* меньше длины отрезка *OB* (рис.1,*а)*. Предполагается, что вероятность попадания точки на отрезок пропорциональна длине этого отрезка и не зависит от его расположения на числовой оси.

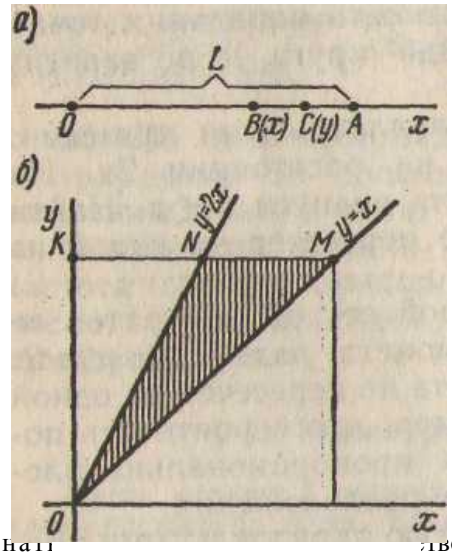


Рис.1

Решение. Координат[ы] [удов]летворять неравенствам 0 ≤ x ≤ L, 0 ≤ x ≤ L, *y≥x*. Введем в рассмотрен[ие] координат *xOy*. В этой системе указанным неравенствам удовлетворяют координаты любой точки, принадлежащей прямоугольному треугольнику *OKM* (рис. 1, *б)*. Таким образом, этот треугольник можно рассматривать как фигуру *G*, координаты точек которой представляют соответственно все возможные значения координат точек *B* и *C*.

Длина отрезка *BC* должна быть меньше длины отрезка *OB,* т. е. должно иметь место неравенство *y – x < x,* или *y* < 2*x*. Последнее неравенство выполняется для координат тех точек фигуры *G* (прямоугольного треугольника *OKM),* которые лежат ниже прямой *y* = 2*x* (прямая *ON).* Как видно из рис. 1.6, все эти точки принадлежат заштрихованному треугольнику *ONM.* Таким образом, этот треугольник можно рассматривать как фигуру *g,* координаты точек которой являются благоприятствующими интересующему нас событию (длина отрезка BC меньше длины отрезка *OB).*

Ответ. *P* = Пл.*g*/Пл.*G* = Пл.*ONM*/ Пл.*OKM* = 1/2.

2.2. На плоскость, разграфленную параллельными прямыми, отстоящими друг от друга на расстоянии 6 см, наудачу брошен круг радиуса 1 см. Найти вероятность того, что круг не пересечет ни одной из прямых. Предполагается, что вероятность попадания точки на отрезок пропорциональна длине отрезка и не зависит от его расположения.

Ответ. *P* = (6 – 2)/6 = 1/3.

3.1. Дана функция распределения непрерывной случайной величины

F*(*x*)** = {0 при ***x ≤ 0; sin***x*** при 0 < ***x*** ≤ π/2, 1 при ***x*** > π/2. Найти плотность распределения ***f*(*x*)**.

Плотность распределения равна первой производной от функции распределения:

0 при ***x*** < 0,

cos***x*** при 0 < ***x*** <л/2,

0 при ***x*** > л/2.

при ***x*** = 0 производная ***F***' (x) не существует.

3.2. Данные по 5 титрованиям (в мл.):

14,10; 14,20; 14,15; 14,25; 14,20.

Рассчитать:
среднее и стандартное отклонение,
доверительные интервалы для двухсторонней критической области при α = 0,90; 0.95.
Известно, что генеральное стандартное отклонение 0,03 мл. Определить доверительные интервалы при тех же условиях.
Сколько надо параллельных определений, чтобы доверительный интервал равнялся ± 0,22 при α = 0.95.

3.3. Вы приобретаете партию дезинфицирующего раствора только в том случае, если содержание хлора не меньше, чем 5,5%. Вы провели 6 испытаний:
3,41; 3,36; 3,51; 3,56; 3,40; 3,52.
Какова доверительная вероятность, что вы получите средство с заявленным содержанием хлора?

3.4. Имели следующие результаты попарного анализа:

Образец	Методика 1	Методика 2	d_i
1	25	31	–6
2	30	21	+9
3	21	33	–7
4	42	19	+23
5	19	39	–20
6	22	24	–2
7	21	22	–1
8	32	33	–1
9	18	28	–10
10	35	20	+15

Решить задачу попарным t-тест-анализом и методом средневзвешенных оценок.

3.5. Результаты определения никеля двумя методиками (А и Б):
А: n = 10, $C_{ср}$ = 18,0, S_{10} = 0,52.
Б: n = 10, $C_{ср}$ = 18,3, S_{10} = 0,21.
Есть ли значимое различие между дисперсиями для α = 0.95 и $F_{9,9}$ = 3,14?
Значимо ли разняться средние (α = 0.95)?

4.1. Устройство состоит из 3 независимо работающих элементов. Вероятность отказа каждого элемента в одном опыте равна 0,1. Составить закон распределения числа отказавших элементов в одном опыте.
Решение. Дискретная случайная величина X (число отказавших элементов в одном опыте) имеет следующие возможные значения: $x_1 = 0$ (ни один из элементов устройства не отказал), $x_2 = 1$ (отказал один элемент), $x_3 = 2$ (отказали два элемента) и $x_4 = 3$ (отказали три элемента).
Отказы элементов независимы один от другого, вероятности отказа каждого элемента равны между собой, поэтому применима формула Бернулли. Учитывая, что по условию $n = 3$, $p = 0{,}1$ (следовательно, $q = 1 - 0{,}1 = 0{,}9$), получим:
$P_3(0) = q^3 = 0{,}9^3 = 0{,}729$; $P_3(1) = C_3^1 pq^2 = 3\times0{,}1\times0{,}9^2 = 0{,}243$; $P_3(2) = C_3^2 p^2 q = 3\ 0{,}1^2\ 0{,}9 = 0{,}027$; $P_3(3) = p^3 = 0{,}1^3 = 0{,}001$.
Контроль: 0,729 + 0,243 + 0,027 + 0,001 = 1.
Напишем искомый биномиальный закон распределения X:

X	0	1	2	3
p	0,729	0,243	0,027	0,001

4.2. Учебник издан тиражом 100000 экземпляров. Вероятность того, что учебник сброшюрован неправильно, равна 0,0001. Найти вероятность того, что тираж содержит ровно пять бракованных книг.

Решение. По условию, n =100000, p = 0,0001, k = 5. События, состоящие в том, что книги сброшюрованы неправильно, независимы, число n велико, а вероятность p мала, поэтому воспользуемся распределением Пуассона

$$P_n(k) = \lambda k e^{-\lambda}/r!$$

Найдем $\lambda = np = 10$
Искомая вероятность
$P_{100000}(5) = 10^5 e^{-10}/5! = 10^5 .0{,}000045/120 = 0{,}0375$

7.1. Рассчитайте стандартное отклонение для результата вычисления:
y = [(6,10 ± 0,04)·(0,0060 ± 0,0002)]/(1,94 ± 0,04) + [(2,11± 0,03) – (1,23 ± 0,03)] = …±…?

$y = [(3{,}10 \pm 0{,}03)\cdot(0{,}0055 \pm 0{,}0002)] + (1{,}43 \pm 0{,}03)\times [(3{,}14 \pm 0{,}02) - (1{,}21 \pm 0{,}04)] = \ldots\pm\ldots?$
$y = [(5{,}11 \pm 0{,}02)/(0{,}0060 \pm 0{,}0004)]\times(1{,}94 \pm 0{,}02) + [(4{,}12 \pm 0{,}02) - (1{,}23 \pm 0{,}03)/(0{,}23 \pm 0{,}02] = \ldots\pm\ldots?$

8.1. Заданы вероятности трех событий: A_1, A_2, A_3, образующих полную группу: $p_1 = P(A_1) = 0{,}25$, $p_2 = P(A_2) = 0{,}35$, $p_3 = P(A_3) = 0{,}40$. Разыграть пять испытаний, в каждом из которых появляется одно из трех рассматриваемых событий.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Основная литература

1. **Скатецкий В.Г.** Математические методы в химии: Учебное пособие для студентов вузов - : ТетраСистемс, 2006. - 368с. - ISBN 985-470-434-3.
2. **Бахвалов Н.С.** Численные методы: Учеб.пособие для вузов /. - 4-е изд. - М.: БИНОМ.Лаборатория знаний, 2006. - 636с. - (Классический университетский учебник). - Список лит.: с.624.- Предм.указ.:с.629. - ISBN 5-94774-396-5 .
3. **Систематические и случайные погрешности химического анализа**: Учебное пособие для вузов / Под ред. М.С.Черновьянц. - М.: Академкнига, 2004. - 160с.: ил. - Лит.:с.142.-Прил.:с.145. - ISBN 5-94628-154-2.
4. Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебн. пос., 2-е изд., перераб..-Лань-Трейд, 2014. - ISBN 978-5-8114-1533-5I680
5. Васюкова А.Н.
   Типовые расчеты по физической и коллоидной химии : Учебное пособие / А. Н. Васюкова. - 1-е изд. - СПб. : Лань : Лань-Трейд, 2014. - ISBN 978-5-8114-1605-9I660.

Дополнительная литература

1. Осташков В.Н. Практикум по решению инженерных задач математическими методами: Учебное пособие для вузов / Осташков В.Н. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. - 200с.: ил. - (Математическое моделирование). - Список лит.:с.199. - Лауреат конкурса НМС по математике 2010 г. "Лучшее учебное пособие по математике в номинации: математика в технических вузах. Дополнительная литература". - ISBN 9785996306282.
2. Основы информатизации и математического моделирования экологических систем: Учебное пособие / В.П. Мешалкин, О.Б. Бутусов, А.Г. Гнаук. - М.: ИНФРА-М, 2010. - 357 с.: 60x88 1/16. - (Высшее образование).
3. Костомаров Д.П. Вводные лекции по численным методам: Учебное пособие для вузов / Костомаров Дмитрий Павлович, Фаворский Антон Павлович. - М.: Логос, 2004

Журналы:

1. **Журнал неорганической химии**/ Учредитель:РАН, отд.физикохимии и технологии неорганических материалов; гл.ред.Ю.А.Буслаев.-М.:МАИК НАУКА.- Журнал, выходит 1 раз в месяц.-основан в январе 1956 года.
2. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия
3. .Журнал аналитической химии
4. Геохимия

ЭБС и БД на основе лицензионных соглашений с университетом Дубна

Журналы Американского химического общества (ACS)
Электронная библиотека диссертаций РГБ
Elibrary.ru. Научная электронная библиотека (РУНЭБ)
Royal Society of Chemistry

Наукометрические и реферативные базы данных

SCIENCE INDEX на основе данных РИНЦ
Scopus
Web of Science

Электронно-библиотечные системы

ЭБС "КнигаФонд"

ЭБС "Лань"
ЭБС "Университеская библиотека онлайн"
ЭБС НЭЛБУК
ЭБС Znanium.com

Журналы, газеты on-line

Beilstein Journal of Organic Chemistry (BJOC)
Биорганическая химия
Вестник Московского университета. Сер.2. Химия
Вестник Московской государственной академии тонкой химической технологии им.М.В.Ломоносова
Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология
Мембраны
Российский химический журнал
Сорбционные и хроматографические процессы
Успехи химии
Физика и химия новых материалов

Ресурсы Интернет

Аналитическая химия в России
Ресурсы WWW для химиков
ХиМиК.ru
Химическая технология
Химический сервер
Химический ускоритель
Nanoscale Research Letters
Oraganic Laboratory
Organic Chemistry Portal

Библиографические базы данных

Базы данных ИНИОН
Всероссийский институт научной и технической информации (ВИНИТИ)
Библиографическая база данных Ingenta

Российские библиотеки

1. Российская Государственная Библиотека (РГБ)
2. Российская национальная библиотека (РНБ), г. Санкт-Петербург
3. Библиотека по естественным наукам РАН (БЕН РАН)
4. Государственная публичная научно-техническая библиотека (ГПНТБ)
5. Научно-техническая библиотека ОИЯИ
6. Научная библиотека МГУ им. М. В. Ломоносова
7. Библиотека университета «Дубна