

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 5 от «24» января 2022 г.
Зав. кафедрой _____ /Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
_____ /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина

Численные методы и программирование

Обязательная часть

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность).
04.03.01. Химия

Направленность (профиль) подготовки

Аналитическая химия;


Высокомолекулярные соединения;

Органическая и биорганическая химия;

Физическая химия;

Квалификация

Бакалавр

Разработчик (составитель) <u>Проф., д-р хим. наук, профессор</u> (должность, ученая степень, ученое звание)	 _____/ <u>Янборисов В.М.</u> (подпись, Фамилия И.О.)
---	---

Для приема: 2022 г.

Уфа 2022 г.

Составитель / составители: Янборисов В.М.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 5 от «24» января 2022 г.

Заведующий кафедрой



/ Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	5
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	5
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	5
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	7
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	1 3
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	1 3
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	1 4
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	1 5

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	ПК-5. Способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	ПК-5.1 Знать возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Знать: возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов
		ПК-5.2. Уметь применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Уметь: применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов
		ПК-5.3. Владеть навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Владеть: навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Численные методы и программирование» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, дисциплинам по выбору.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3 семестре.

Цель изучения дисциплины: научить студентов использовать численные методы при обработке экспериментальных данных в различных областях химии.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции:

ПК-5 Способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий

Уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения	
		не зачтено	зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Не знает	В полной мере знает возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов
Второй этап (уровень)	Уметь: применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Не умеет	В полной мере умеет применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов

Третий этап (уровень)	Владеть: навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Не владеет	В полной мере владеет навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов
-----------------------	--	------------	---

Критериями оценивания при *модульно-рейтинговой системе* являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (*для экзамена*: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10; *для зачета*: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

(для экзамена:

от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;

от 60 до 79 баллов – «хорошо»;

от 80 баллов – «отлично».

для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),

не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-4 способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности	<i>Знать</i> : основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности ;основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Уметь</i> : проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач <i>Уметь</i> : применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Владеть</i> : навыками работы с научными и образовательными порталами; базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
ОПК-5 способностью к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации	<i>Знать</i> : стандартные методы поиска, обработки и анализа научной информации, правила обработки и оформления результатов поиска, обработки и анализа	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Уметь</i> : проводить анализ научной информации и формулировку на их основе выводов и предложений	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Владеть</i> базовыми навыками поиска, и обработки научной информации	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
ПК-5 способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	<i>Знать</i> : возможности, достоинства и недостатки, а также границы применимости современных стандартных профессиональных технологий обработки результатов научных экспериментов	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Уметь</i> : применять современные стандартные профессиональные компьютерные технологии получения и обработки результатов научных экспериментов	Индивидуальный, групповой опрос собеседование
	<i>Владеть</i> : навыками использования современных стандартных профессиональных компьютерных технологий получения и обработки результатов научных экспериментов	Индивидуальный, групповой опрос собеседование

4.3 Рейтинг-план дисциплины

Численные методы и программирование
(название дисциплины согласно рабочему учебному плану)

направление: 04.03.01 Химия

курс 2, семестр 3

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Текущий контроль				
1. Опрос	8	9	0	72
Рубежный контроль				
1. Опрос	28	1	0	28
Посещаемость				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10
			Итого	100
Поощрительные баллы				
Участие в олимпиадах	1		0	1
Участие в конференциях	2		0	2
Публикация тезисов	3		0	3
Публикация статей	4		0	4
			Итого	10

Перевод оценки из 100-балльной в систему зачет/незачет производится следующим образом:

- зачтено – от 59 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- не зачтено – от 0 до 59 баллов.

Критерии оценки (в баллах) аудиторной и домашней работы

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Вопросы для аудиторной и домашней работы

Занятие № 1

Введение. Предмет дисциплины. Роль математических методов и моделей в познании и научном объяснении явлений и процессов реального физического мира. Закон, закономерность и модель в современной науке.

Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике. Практи-

ческое значение и эффективность использования ЭВМ при решении прикладных тематических задач. Связь предмета со специальными дисциплинами.

Понятие модели. Общенаучные основы моделирования. Структуризация. Разновидности модели. Планирование эксперимента. Численные методы. Алгебраические модели. Имитационные модели.

Общая характеристика процессов моделирования. Обоснование структуры, входов и выходов модели. Оценка качества модели. Математическое моделирование и использование ЭВМ.

Занятие № 2

Эксперимент, пространство выборки и результат. Статистика и вероятность. Повторение испытаний.

Закон больших чисел. Центральная предельная теорема. Сбор и анализ данных. Сжатие данных.

Функция плотности и функция распределения. Многомерные распределения.

Кривые распределения и их виды. Меры расположения и рассеяния.

Моменты и семиинварианты. Характеристические функции.

Стандартные распределения (биномиальное, пуассоновское, логарифмическое, гипергеометрическое, нормальное, семейство распределений Пирсона, ряды Грамма-Шарлье, распределение Коши). Другие распределения, связанные с нормальным (Стьюдента, Фишера).

Многомерное нормальное распределение. Пакеты статистических программ для обработки данных.

Занятие № 3

Теоретическая модель и ее согласованность с данными опыта. Критерии значимости. Доверительный интервал.

Описание, анализ и предсказание в статистической теории. Критерии согласия. Классификация оценок. Методы нахождения оценок параметров распределения. Метод максимума правдоподобия.

Занятие № 4

Основы теории общей линейной модели. Однофакторный дисперсионный анализ. Многофакторный дисперсионный анализ. Адекватность модели.

Статистические выводы: критерии значимости, критерии согласия.

Занятие № 5

Простая линейная регрессия и корреляционный анализ. Множественная линейная регрессия, множественная и частная корреляция. Ранг случайной величины. Показатель корреляции рангов.

Множественная корреляция. Корреляционная матрица. Вычисление значений зависимого признака на основе регрессии.

Метод наименьших квадратов. Уравнения параболического вида. Логарифмические и степенные функции.

Другие уравнения применяемые в моделях. Общие принципы выбора уравнения регрессии. Прикладные программы корреляционного и регрессионного анализов.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Теория вероятностей и математическая статистика. Учебное пособие. / Яковлев В. П. / 2-е изд. - М.: Дашков и Ко, 2011. - 182 с. / Электронный читальный зал БГУ
2. Введение в математическое моделирование. Учебное пособие. / Под редакцией: Трусов П. В. М.: Логос, 2004. - 439 с. / Электронный читальный зал БГУ
3. Численные методы. / Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л. / М.: Физматлит, 2006. - 400 с. / Электронный читальный зал БГУ

Дополнительная литература:

4. Афифи, А. Статистический анализ: подход с использованием ЭВМ / А. Афифи, С. Эйзен. – М.: Мир, 1982. – 488 с.
5. Акулич, И.Л. Математическое программирование в примерах и задачах / И.Л. Акулич. – М.: Высшая школа, 1986. – 319 с.
6. Прицкер, А. Введение в имитационное моделирование / А. Прицкер. – М.: Мир, 1987. – 644 с.
7. Розен, В.В. Математические модели принятия решений в экономике / В.В. Розен. – М.: Высшая школа, 2002. – 288 с.
8. Рыжиков, Ю.И. Имитационное моделирование / Ю.И. Рыжков. – СПб.: КОРОНА принт; М.: Альтекс-А, 2004. – 384 с.
9. Бегун, П.И. Моделирование в биомеханике / П.И. Бегун, П.Н. Афонин. – М.: Высшая школа, 2004. – 390 с.
10. Орехов, Н.А. Математические методы и модели в экономике / Н.А. Орехов, А.Г. Левин, Е.А. Горбунов. – М.: Юнити - ДАНА, 2004. – 302 с.
11. Самарский, А.А. Математическое моделирование / А.А. Самарский. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalog/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License

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

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>
Аудитория № 405	Лекции	Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic
Аудитория № 311		Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white
Аудитория № 310		Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183
Аудитория № 305		Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183
Компьютерный класс № 004	Лабораторные работы	<p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональные компьютеры Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт., шкаф настенный TLK6U</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные 2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные 3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019 4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU 5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License
Компьютерный класс № 005	Лабораторные работы	<p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MD i5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные 2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные 3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019 4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU 5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

на 3 семестр

очная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	6/216
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	90
лекций	36
практических/ семинарских	-
лабораторных	54
контроль самостоятельной работы (КСР)	-
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР) включая подготовку к экзамену/зачету	125,8

Форма(ы) контроля:

зачет 3 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)					Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		Всего	ЛК	ПР СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Введение. Классификация моделей и методов решения задач	26	6	-	12	18	[1-4, 6, 11]	1-10 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
2	Статистический анализ: теория распределений	26	6	-	12	20	[1,3,4]		Проверка домашней и аудиторной работы
3	Статистические выводы: критерии значимости, критерии согласия	20	6	-	8	14	[1,2,7]	11-20 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
4	Дисперсионный анализ	18	4	-	6	18	[5,8]	21-35 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
5	Регрессионный и корреляционный анализы .	18	4	-	8	16	[1,9,10]	40-55 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
6	Методы многомерного статистического анализа	8	4	-	-	15.8	[1,2,6]	56-70 [6]	Проверка домашней и аудиторной работы
7	Статистический анализ временных рядов	28	6		8	24	[3,4]		Проверка домашней и аудиторной работы
	Всего часов:	216	36		54	125,8			