

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Численные методы в химии полимеров

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Высокомолекулярные соединения

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

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 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018,
2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Численные методы в химии полимеров**
2. Уровень высшего образования – **специалитет**.
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**.
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С Владение современными теоретическими и экспериментальными методами исследования высокомолекулярных соединений и материалов на их основе, способность использовать эти методы при решении задач в профессиональной деятельности	Знать: теоретические основы методов исследования полимеров и принципы их конструирования Уметь: осмысленно решать конкретные лабораторные задачи с использованием новых и разнообразных методов исследования полимеров Владеть Теоретическими основами методов исследования полимеров и численными методами моделирования полимерных систем

6. Объем дисциплины 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 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

знать: основы науки о полимерах, основы математического анализа и математической статистики;

уметь: анализировать экспериментальные данные с помощью элементарных математических операций;

владеть: основными методами работы с операционной системой офисным персональных компьютеров, начальными навыками программирования и работы в офисных приложениях.

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа 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
Использование компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика.	9	2	2				4	5		5
Методы анализа экспериментальных данных.	21	6	6				12	9		9
Численные методы решения некоторых математических задач, встречающихся в работе химика-экспериментатора.	21	6	6				12	9		9

Основы компьютерного моделирования полимерных систем	13	4	4				8	5		5
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	8			2		2	4		4	4
Итого	72	18	18	2		2	40	28	4	32

9. 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.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Физика в мире полимеров. М.: Наука, 1989, 208 с.

Дополнительная литература

1. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989, 344 с.

Программное обеспечение

использование не предусмотрено

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: доц. к.х.н. Королёв Б.А., проф. д.ф.-м.н. Василевская В.В.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачёта. На зачёте проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Контрольные вопросы

1. Как с помощью метода Монте Карло вычислить число π ?
2. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, способы их определения.
3. Экспериментальные ошибки, причины их возникновения. Классификации ошибок измерения по их свойствам и способам представления.
4. Взвешенный метод наименьших квадратов (ВМНК). Использование ВМНК при анализе разнородных по точности данных.
5. Численное интегрирование. Сравнительный анализ метода прямоугольников, метода трапеций и параболического метода Симпсона. Оценка точности.
6. Применим ли метод наименьших квадратов (МНК) для определения энергии активации и ошибки ее определения в случае линеаризованного уравнения Аррениуса?

Тесты

1. В результате математической обработки результатов измерения должно быть получено:

- A - Значение измеряемой величины и его погрешность
- B - Значение измеряемой величины
- C - Погрешность измеряемой величины
- D - Нет правильных вариантов

2. Как классифицируются погрешности по своим свойствам?

- A - Случайные и систематические
- B - Абсолютные и относительные
- C - Приборные и калибровочные
- D - Статистические и динамические

3. Как классифицируются погрешности по виду представления?

- A - Абсолютные и относительные
- B - Случайные и систематические
- C - Приборные и калибровочные
- D - Статистические и динамические

4. Какое распределение используется для построения доверительного интервала?

- A - Распределение Стьюдента
- B - Нормальное распределение
- C - Равномерное распределение

D - Логарифмическое распределение

5. Какую ошибку можно уменьшить, увеличивая число измерений?

A - Только случайную ошибку

B - Только систематическую ошибку

C - Как систематическую, так и случайную ошибку

D - Никаких ошибок нельзя уменьшить

6. Какое распределение описывает случайную ошибку?

A - Нормальное распределение

B - Распределение Стьюдента

C - Равномерное распределение

D - Логарифмическое распределение

7. Какое высказывание о наличии экстремумов у функции плотности вероятности верно?

A - Нет правильных высказываний

B - У функции плотности вероятности имеется хотя бы один минимум

C - У функции плотности вероятности не может быть минимума

D - У функции плотности вероятности не может быть максимума

8. Какое ограничение на функцию плотности вероятности накладывает условие нормировки?

A - Интеграл от функции плотности вероятности по всей числовой оси равен единице

B - Интеграл от функции плотности вероятности по всей числовой оси равен нулю

C - Интеграл от функции плотности вероятности по всей числовой оси положителен

D - Функция плотности вероятности неотрицательна

9. Чем определяется предел точности измерения?

A - Нет правильных вариантов

B - Случайной ошибкой

C - Систематической ошибкой

D - Суммой случайных и систематических ошибок

10. Как можно выявить и проанализировать систематические ошибки?

A - Нет правильных вариантов

B - Методами математической статистики

C - Сравнивая результаты повторных измерений

D - Выявить и проанализировать систематические ошибки невозможно

11. Какую ошибку можно уменьшить, внося поправку в результаты измерения?

A - Только систематическую ошибку

B - Только случайную ошибку

C - Как систематическую, так и случайную ошибку

D - Никаких ошибок нельзя уменьшить

Контрольные задачи

1. В таблице приведены результаты измерения величины Y при различных значениях величины X :

X	2	4	5	7
Y	-11	-10	2	29

Предполагается, что рассматриваемые величины связаны следующим соотношением:

$$y(x) = x \cdot (a \cdot x + b)$$

Определите значения параметров a и b , при которых указанная функция наилучшим образом описывает наблюдаемые экспериментальные данные.

2. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$x^3 + x = 3$$

3. В таблице приведены результаты измерения величины Y при различных значениях величины X :

X	1	2	4	5
Y	3	8	12	16

Предполагается, что рассматриваемые величины связаны следующим соотношением:

$$y(x) = a \cdot x$$

Определите значения параметров a и b , при которых указанная функция наилучшим образом описывает наблюдаемые экспериментальные данные.

4. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$e^x = 2 - x$$

5. Известно значение трех величин a , b и c :

$$\begin{aligned} a &= 2,3 \pm 0,1 \\ b &= 4,0 \pm 0,2 \\ c &= 1,52 \end{aligned}$$

Относительная погрешность величины c равна 5%.

Найдите значение $y = a \cdot b + c^2$ и оцените точность результата.

6. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$e^x = x^2$$

Вопросы к зачёту

1. Основные направления использования компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика. Классификация этапов развития функциональных возможностей компьютеров.
2. Анализ результатов эксперимента. Проверка теоретических значений и зависимостей. Учет ошибок измерений.
3. Экспериментальные ошибки, причины их возникновения. Классификации ошибок измерения по их свойствам и способам представления. Способы учета и уменьшения ошибок. Теоретический предел точности измерения.
4. Случайная ошибка как случайная величина. Функция плотности вероятности и ее основные свойства. Функция плотности вероятности случайной ошибки.
5. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, способы их определения. Связь математического ожидания и дисперсии с измеряемым значением и его ошибкой. Прямая и обратная задача.
6. Метод наименьших квадратов (МНК), его принцип и обоснование. Линейные и нелинейные задачи. Линеаризация. Взвешенный метод наименьших квадратов (ВМНК). Использование ВМНК при анализе разнородных по точности данных. Проверка гипотез.
7. Численные методы решения некоторых вычислительных задач. Решение нелинейных уравнений и систем уравнений. Численное интегрирование и дифференцирование. Сплайн-сглаживание.
8. Численные эксперименты и компьютерное моделирование, их понятие и основные принципы. Усреднение по времени и по ансамблю. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.
9. Основные требования, предъявляемые к компьютерным моделям. Решеточные и континуальные модели. Периодические граничные условия. Способы создания начальных конформаций и их дальнейшая модификация.

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	2	3	4	5
Результат				
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 неприципиального 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: теоретические основы методов исследования полимеров и принципы их	мероприятия текущего контроля

конструирования	успеваемости, устный опрос на зачете
<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: осмысленно решать конкретные лабораторные задачи с использованием новых и разнообразных методов исследования полимеров</p>	Разбор кейсов
<p>Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть теоретическими основами методов исследования полимеров и численными методами моделирования полимерных систем</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, выступление на научном семинаре, устный опрос на зачете