

О ПРЕПОДАВАНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Н. А. Дегтяренко, В. А. Прокашева

Белорусский государственный университет

Минск, Беларусь

E-mail: natdegt@inbox.ru, PROVER@bsu.by

В статье представлен взгляд авторов на новую учебную программу дисциплины «Математическое моделирование химических процессов», разработанную преподавателями кафедры общей математики и информатики механико-математического факультета БГУ для студентов химического факультета. Анонсируются главные принципы, цели, содержание программы, а также основные предполагаемые знания и умения, которыми должны обладать студенты в результате изучения дисциплины.

В связи с усилением междисциплинарных и интеграционных тенденций в преподавании дисциплин в высшей школе, а также с привлечением высоких технологий в процессе преподавания и обучения интересными представляются курсы, методически разработанные с учетом следующих основных принципов: интеграционный, или междисциплинарный, подход; применение компьютерных технологий; усиление роли самостоятельной работы студентов в процессе освоения учебного материала. Именно на таких принципах строится программа учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов», которая была разработана преподавателями кафедры общей математики и ин-

форматики механико-математического факультета БГУ для студентов второго курса химического факультета (специальность «Химия», направления: научно-производственная деятельность, научно-педагогическая деятельность).

Математическое моделирование химического процесса представляет собой исследование природы и механизма химических реакций с помощью математической модели. Оно позволяет применять современный математический аппарат и вычислительную технику. На основе математической модели может быть разработан ее компьютерный аналог путем программирования математических зависимостей модели. Численные исследования с помощью ПЭВМ обеспечивают получение результатов, которые оценивают и сопоставляют с моделируемой системой. Этапы моделирования можно представить следующим образом:

1. Формулируют цель математического моделирования изучаемого химического процесса.
2. В соответствии с целью, исходными физико-химическими законами и данными об изучаемом химическом процессе рассматривают его установленный механизм или вырабатывают статистические гипотезы о механизме исследуемого процесса. Этот этап реализует принцип физико-химической обоснованности модели.
3. Строят совокупность математических объектов, соответствующих механизму исследуемого химического процесса. Эти объекты образуют математическую модель.
4. Подбирают подходящий метод решения полученной математической задачи и реализуют его с помощью компьютерного моделирования.
5. Проводят анализ полученных результатов. Этот этап показывает, насколько адекватной исходным данным является построенная модель.

Перечислим *основные цели* преподавания рассматриваемой учебной дисциплины. Они таковы: придать общему курсу математики для студентов специальности «Химия (по направления: научно-производственная деятельность, научно-педагогическая деятельность)» профессиональную направленность; сформировать у студентов представление о математическом аппарате современной химии; привить студентам первичные навыки построения математических моделей химических процессов и реализации этих моделей с помощью современных методик использования компьютера.

Остановимся теперь на структуре содержания учебного материала и некоторых его элементах. Содержание учебного материала структурно представлено тремя основными блоками. В первом блоке дается краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы для реализации математического моделирования на компьютере. Здесь следует остановиться на прикладных математических пакетах (MathCAD, MatLab, Mathematica), статистических пакетах (STATISTICA, SPSS, STADIA), а также уделить внимание интеллектуальному анализу данных: идеологии разведочного анализа данных EDA (exploratory data analysis), концепции OLAP (online analytical processing) и Data Mining, их специальным приложениям в прикладной химии, молекулярной генетике и геной инженерии, медицине.

Здесь же, в первом блоке, подробнее рассматриваются универсальная техническая компьютерная система Mathematica, разработанная американской компанией Wolfram Research Inc., и табличный процессор Microsoft Excel – составляющий стандартного пакета Microsoft Office. Универсальная техническая компьютерная система Mathematica является одним из наиболее распространенных в мире программных средств, которое позволяет весьма эффективно выполнять как численные, так и символьные вычисления, имеет развитую двумерную и трехмерную графику и встроенный язык программирования высокого уровня. Указанные возможности этого пакета и удобный пользовательский интерфейс обеспечили ему широкое применение во многих областях современного естествознания и в учебном процессе. К ее достоинствам также можно отнести обширные специальные при-

ложения. Табличный процессор Excel в общих чертах изучался студентами на первом курсе в рамках учебной дисциплины «Основы информационных технологий». Здесь он рассматривается в качестве универсального пакета, содержащего основные методы математической статистики. Возможностей этого процессора вполне достаточно, чтобы решать статистические задачи, предлагаемые на практических занятиях студентам второго года обучения, кроме того, его использование при решении задач позволяет применить, закрепить и расширить знания, полученные студентами на первом курсе. В Excel существуют как возможности самостоятельного оформления пользователем решения задачи, включающего программирование формул, построение графиков, гистограмм, написание макросов и т. д., так и возможности использования встроенных подпрограмм.

Второй блок образован рядом математических моделей задач химического содержания, для реализации которых на ПЭВМ используется универсальная техническая компьютерная система Mathematica. Модели сгруппированы по перечисленным ниже математическим темам, где после названия темы следуют элементы содержания учебного материала. Тема «Системы линейных алгебраических уравнений»: расчет смесей сложного состава; исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров; классический матричный метод в применении к прямой кинетической задаче. Тема «Решение нелинейных уравнений»: химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями. Тема «Элементы исследования функции одной переменной»: исследование влияния щелочи, добавляемой в раствор кислоты, на pH раствора; исследование константы скорости элементарной реакции в неизотермической кинетике (уравнение Аррениуса); исследование функции скорости химической реакции (убывание, возрастание, экстремальные значения, построение графика). Тема «Интегралы от функции одной переменной»: инверсия сахаров; простая перегонка; радиоактивный распад; задача о концентрации раствора; кинетика простых реакций. Тема «Дифференцирование и интегрирование функций нескольких переменных»: процесс многоступенчатой экстракции; вычисление суммарной радиоактивности плоской или пространственной области с неоднородной непрерывной плотностью радиоактивности. Тема «Обыкновенные дифференциальные уравнения»: двухстадийные реакции, протекающие в закрытых системах (обратимые реакции, последовательные реакции, параллельные реакции первого порядка, простейшая автокаталитическая реакция); кинетические модели реакций, протекающих в открытых системах; пример кинетического моделирования с использованием кусочно-непрерывной функции; химические процессы, описываемые системами обыкновенных дифференциальных уравнений. Тема «Дифференциальные уравнения с частными производными»: метод конечных разностей; краевые задачи диффузионных процессов и распределения температуры; стационарные граничные задачи; моделирование динамики молекулярных систем.

Третий блок образован рядом статистических моделей задач химического содержания, для реализации которых на ПЭВМ используется табличный процессор Excel. Одним из важнейших моментов в деятельности специалиста в области химии, экологии, охраны окружающей среды является принятие решений в условиях неопределенности. При этом наиболее разработанным инструментарием является математическая статистика, позволяющая решать задачи в условиях вероятностной неопределенности и имеющая достаточно распространенное программное обеспечение. Во всех задачах третьего блока предполагается использование в качестве исходного статистического материала эмпирических данных, полученных в ходе конкретного химического эксперимента с целью исследования некоторого признака (некоторых признаков) рассматриваемого химического процесса. Интерпретация статистических выводов предполагается в терминах химического содержания задачи. Статистические модели сгруппированы в третьем блоке по следующим темам: «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания», «Первоначальная статистическая

обработка экспериментальных данных» (генеральная и выборочная совокупности; дискретное статистическое распределение выборки; эмпирическая функция распределения выборки; интервальное статистическое распределение выборки); «Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения» (точечные и интервальные оценки числовых характеристик генеральной случайной величины; выбраковка результатов химического анализа), «Проверка непараметрических статистических гипотез» (критерии согласия Пирсона и Колмогорова), «Корреляция и регрессия».

Перечислим основные предполагаемые знания и умения, которыми должны обладать студенты. В результате изучения дисциплины необходимо *знать*:

- роль математических методов в современной химии;
- основные этапы математического моделирования химического процесса;
- названия, назначение, основные характеристики прикладных математических и статистических программных средств, предусмотренных рассматриваемой программой;
- основные возможности универсальной технической компьютерной системы Mathematica и табличного процессора Excel, позволяющие реализовывать на компьютере математическое моделирование задач химического содержания;
- детерминированные модели химических процессов, предусмотренные программой;
- вероятностно-статистические модели химических процессов, предусмотренные программой.

В результате изучения дисциплины необходимо *уметь*:

- формулировать цель математического моделирования изучаемого химического процесса;
- строить детерминированную или вероятностно-статистическую модель исследуемого химического процесса с учетом принципа физико-химической обоснованности модели;
- выбирать подходящий метод решения полученной математической задачи и ориентироваться в возможностях его реализации с помощью современных методик использования компьютера;
- реализовывать компьютерное моделирование учебных задач с помощью универсальной технической компьютерной системы Mathematica и табличного процессора Excel;
- обеспечивать рациональный импорт исходных данных в выбранную компьютерную программу и грамотный анализ полученных результатов на предмет адекватности построенной модели исходным данным задачи;
- при помощи информационных технологий находить дополнительную информацию о методах математического моделирования и о применении программного обеспечения для решения математических моделей.

В заключение отметим, что при использовании студентами различных программных средств особое внимание следует уделить процессу подготовки данных и их вводу в ту или иную программу (возможно, с преобразованием формата данных), а также этапу анализа полученных результатов. Важно не только уметь правильно математически моделировать химическую задачу, но и грамотно истолковывать тот объем информации, который практически без усилий получается в результате работы программы. Необходимо подчеркнуть, что умелая подготовка данных к вводу в программу имеет своей целью автоматизировать как можно большее количество самых различных рутинных операций при проведении исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Вентцель, Е. С.* Прикладные задачи теории вероятностей / Е. С. Вентцель, Л. А. Овчаров. М. : Радио и связь, 1983. 320 с.
2. *Гмурман, В. Е.* Теория вероятностей и математическая статистика / В. Е. Гмурман. М. : Высш. шк., 1998. 479 с.
3. *Горелова, Г. В.* Теория вероятностей и математическая статистика в примерах и задачах с применением Excel / Г. В. Горелова, И. А. Кацко. Ростов н/Д : Феникс, 2005. 480 с.
4. *Гусак, А. А.* Высшая математика: в 2 т. / А. А. Гусак. Минск : ТетраСистемс, 2001–2003. 2 т.
5. *Дегтяренко, Н. А.* Математическая статистика / Н. А. Дегтяренко, О. Г. Душкевич. Минск : БГУ, 2008. 141 с.
6. *Коробов, В. И.* Химическая кинетика: введение с MathCAD/Maple/MCS / В. И. Коробов, В. Ф. Очков. М. : Горячая линия-телеком, 2009. 384 с.
7. *Мацкевич, И. П.* Высшая математика: теория вероятностей и математическая статистика / И. П. Мацкевич, Г. П. Свирид. Минск : Выш. шк., 1993. 272 с.
8. *Орлов, А. И.* Прикладная статистика: учебник / А. И. Орлов. М. : Экзамен, 2004. 656 с.
9. *Прокопеня, А. Н.* Применение системы Mathematica к решению обыкновенных дифференциальных уравнений / А. Н. Прокопеня, А. В. Чичурин. Минск : БГУ, 1999. 265 с.
10. *Скатецкий, В. Г.* Математическое моделирование физико-химических процессов / В. Г. Скатецкий. Минск : Выш. шк., 1981. 144 с.
11. *Скатецкий, В. Г.* Математические методы в химии / В. Г. Скатецкий, Д. В. Свиридов, В. И. Яшкин. Минск : ТетраСистемс, 2006. 368 с.
12. *Яшкин, В. И.* Численные методы в химии. Математическое моделирование: практикум для студ. хим. факультета БГУ / В. И. Яшкин. Минск : БГУ, 2005. 99 с.
13. *Баврин, И. И.* Краткий курс высшей математики для химико-биологических специальностей / И. И. Баврин. М. : Физматлит, 2003. 328 с.
14. *Вентцель, Е. С.* Теория вероятностей / Е. С. Вентцель. М. : Высш. шк., 1998. 575 с.
15. *Гмурман, В. Е.* Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике / В. Е. Гмурман. М. : Высш. шк., 1999. 400 с.
16. *Гусак, А. А.* Задачи и упражнения по высшей математике: в 2 т. / А. А. Гусак. Минск : Выш. шк., 1988. Т. 2. 228 с.
17. *Гусак, А. А.* Теория вероятностей: справочное пособие к решению задач / А. А. Гусак, Е. А. Бричикова. Минск : ТетраСистемс, 1999. 288 с.
18. *Лазарев, А. В.* Компьютерная Mathematica / А. В. Лазарев, С. В. Земсков. Минск : ООО «Красико-принт», 2001. 28 с.
19. *Скатецкий, В. Г.* Лекции по математике для студентов химических специальностей / В. Г. Скатецкий. Минск : БГУ, 2000. 387 с.
20. *Тутубалин, В. Н.* Теория вероятностей: краткий курс и научно-методические замечания / В. Н. Тутубалин. М. : Изд-во Моск. ун-та, 1972. 230 с.
21. Справочная система пакета Mathematica.
22. Справочная система программы Microsoft Excel.
23. Справочная система программы Microsoft Visual Basic.
24. Microsoft Office Extensions Разработчикам [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.microsoft.ru/offext/developers/>.
25. Программирование на Visual Basic и VBS-скрипты // Библиотека Интернет Индустрия I2R.ru. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.i2r.ru/static/375/>.