

равномерной на отрезке $[-1,1]$ случайной величины: $F_2(x) = \begin{cases} 0, & x < -1, \\ \frac{x+1}{2}, & x \in [-1,1], \\ 1, & x > 1. \end{cases}$ Объёмы

обеих выборок равны 100 ($n = m = 100$).

В пакете *Statistica 20* раз были смоделированы выборки X и Y из указанных распределений. С помощью критерия Манна – Уитни проверялась гипотеза однородности H_0 . Результаты проверки (истинные уровни значимости) содержатся в *Таблице 2*.

Таблица 2. Истинные уровни значимости (p-value) критерия Манна – Уитни для проверки гипотезы однородности

0,164072	0,009362	0,676973	0,584999	0,971738
0,346231	0,027444	0,682344	0,158950	0,930878
0,930878	0,070401	0,187435	0,678761	0,100347
0,636359	0,330211	0,375765	0,809808	0,352522

Как видно из *Таблицы 2*, критерий Манна – Уитни в большинстве случаев не выявляет статистически значимых различий ($\alpha = 0,05$) между нормальными с параметрами 0, 1 и равномерно распределёнными на $[-1, 1]$ случайными величинами. Заметим, что в этом случае, как и в примере 1,

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} F_1(y) dF_2(y) = \frac{1}{2}.$$

Литература

1. Ивченко Г.И. Математическая статистика / Г.И. Ивченко, Ю.И. Медведев – М.: Высшая школа, 1984. – 248 с.
2. Лагутин М.Б. Наглядная математическая статистика / М.Б. Лагутин – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 472 с.

ПРЕИМУЩЕСТВЕННОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ПРИКЛАДНЫХ УЧЕБНЫХ ДИСЦИПЛИНАХ С КОМПЬЮТЕРНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ НА ХИМИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ БГУ Дегтяренко Н. А., Семёнов А. В.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Одной из неперенных составляющих качественного фундаментального образования будущих специалистов-химиков является хорошая математическая подготовка. Фундаментальные дисциплины используют абстракции математического языка, математические модели и методы для описания и изучения законов природы. С развитием вычислительной техники возрастает прикладное значение математических дисциплин, важных для естественных наук. Основой физико-математической подготовки студентов химического факультета БГУ на первой ступени высшего образования

является курс высшей математики. Учебная дисциплина «Высшая математика» относится к физико-математическому модулю государственного компонента и предусмотрена типовыми и учебными планами всех специальностей химического факультета на первом году обучения. Приведем таблицу распределения аудиторных часов для указанной дисциплины [1].

Таблица 1

Примерное распределение аудиторных часов
для учебной дисциплины «Высшая математика»

№ п/п	Название раздела, темы	Лекции	Практические занятия	Семинары	Всего
I.	Основы алгебры и аналитическая геометрия	20	21	3	44
II.	Математический анализ	46	48	9	103
III.	Дифференциальные уравнения	10	10	2	22
IV.	Теория вероятностей и элементы математической статистики	14	15	2	31
	Итого	90	94	16	200

Основной целью преподавания математических учебных дисциплин является подготовка студентов к использованию современного математического аппарата в качестве эффективного инструмента для решения научных и практических задач в области химических и смежных дисциплин, таких как: «Физика», «Общая химическая технология», «Технология лекарств» и др. Освоение учебной дисциплины «Высшая математика» должно обеспечить формирование *базовой профессиональной компетенции* БПК-1: использовать фундаментальные разделы математики (математический анализ, аналитическую геометрию, дифференциальные уравнения, теорию вероятности и математическую статистику) для решения задач специального содержания. Для обеспечения указанной компетенции необходим опыт решения типовых математических задач, в том числе, имитирующих реальные проблемы, с которыми приходится сталкиваться в практике химических исследований.

В учебный план специальностей 1-31 05 01 Химия (по направлениям) (направление специальности 1-31 05 01-01 научно-производственная деятельность), 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия включена на втором году обучения также учебная дисциплина компонента учреждения высшего образования «Математическое моделирование химических процессов». Приведем таблицу примерного распределения аудиторных часов для этой учебной дисциплины [2].

Таблица 2

Примерное распределение аудиторных часов
для учебной дисциплины
«Математическое моделирование химических процессов»

№ п/п	Название раздела, темы	Лекции	Лабораторные занятия	Семинары	Всего
I.	Программное обеспечение математического моделирования химических процессов	3			3
II.	Детерминированные модели химических процессов		15	3	18

III.	Вероятностно-статистические модели химических процессов	9	11	3	23
	Итого	12	26	6	44

Для сравнения общего количества аудиторных часов, отводимых на изучение математических дисциплин на химическом факультете университета, приведем аналогичные сведения о химическом факультете МГУ [3], например, соответствующие специальности «Фундаментальная и прикладная химия» (уровень – специалитет, квалификация «Химик. Преподаватель химии»), общий поток, шестилетнее обучение (аналог специальностей пятилетнего обучения на третьем потоке химфака БГУ).

Таблица 3

Распределение аудиторных часов
для учебных дисциплин математического цикла в МГУ

№ п/п	Название учебной дисциплины	Лекции	Семинары	Всего
I.	Аналитическая геометрия	18	36	54
II.	Линейная алгебра	18	36	54
III.	Математический анализ	180	162	342
IV.	Уравнения математической физики	18	36	54
V.	Теория вероятностей	36	36	72
VI.	Элементы прикладной и математической статистики	18	18	36

Исходя из приведенных данных, очевидно, что количество аудиторных часов, отводимых на изучение математических дисциплин на химическом факультете БГУ невелико, и при преподавании математических дисциплин акцент делается на восприятие идей, законов, принципов, концепций и обобщений. Преподавание осуществляется на основании междисциплинарного подхода, использовании технических средств и усиленной роли самостоятельной работы студентов. Соблюдается баланс в отношении полноты и математической строгости учебного материала. Дисциплина «Математическое моделирование химических процессов» способствует целостности математического образования студентов-химиков и обеспечивает преемственность этого образования в прикладных учебных дисциплинах с компьютерной составляющей на химическом факультете БГУ.

В качестве примера, иллюстрирующего такую преемственность, приведем подготовку студентов специальности «Фундаментальная химия» к будущей научной деятельности в рамках учебной дисциплины «Сложные химические равновесия и экстракционные процессы». Основной целью данного курса является обучение студентов навыкам математического описания процессов, протекающих в водных и органических растворах, а также на границе между этими фазами. Ключевой частью математической модели является система уравнений, каждое из которых представляет собой один из двух возможных случаев [4]:

1) нелинейное уравнение для выражения константы $K = \frac{[C][D]}{[A][B]}$ равновесия процесса, где K – некоторая константа, значение которой известно или находится в

пределах некоторого доверительного интервала значений; $[A],[B],[C],[D]$ – неизвестные концентрации веществ A, B, C, D ,

2) линейное уравнения баланса (материального или зарядового) вида
$$\sum_{i \in I} [C]_i = \sum_{j \in J} [C]_j$$
, где $[C]_i, [C]_j$ – неизвестные концентрации, а суммирование ведется

по некоторым множествам индексов I и J в соответствии со смыслом поставленной задачи.

В подавляющем большинстве случаев составляют уравнения в таком же количестве, как и число неизвестных, и решают систему средствами универсальной технической системы Wolfram Mathematica, навыки работы с которой получены в рамках учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов». Однако такой подход не всегда позволяет ответить на вопрос о существовании и единственности решения математической модели, можно лишь интуитивно оценить адекватность полученных результатов ее химическому смыслу. Решение системы из большого количества уравнений, чаще нелинейных, следует оптимизировать, выполняя их математические преобразования таким образом, чтобы свести исходную систему к эквивалентной системе из небольшого количества уравнений. Как показывает практика, довольно часто удается свести систему из трех уравнений к одному, из четырех – семи к двум, из восьми – пятнадцати к трем уравнениям полиномиального вида. Каждое уравнение такой упрощенной системы может быть исследовано методами математического анализа и, соответственно, сделаны выводы не только о существовании и количестве решений, но также и о зависимости решения от параметров, например, таких как константы равновесия процессов (см. случай 1). Это очень важно, так как некоторые константы равновесия являются экспериментально недоступными величинами, и можно лишь оценить интервал для этих величин с некоторой надежностью, либо провести оптимизацию некоторого свойства системы по данному параметру. Следует отметить, что решение упрощенной системы уравнений программными средствами дает существенную оптимизацию по сравнению с решением исходной системы, поскольку методы решения систем полиномиальных уравнений лучше разработаны и алгоритмизированы по сравнению с методами решения произвольных систем нелинейных уравнений.

В рамках учебной дисциплины «Сложные химические равновесия и экстракционные процессы» была внедрена стационарная диффузионная модель мультичастичного приближения, впервые предложенная Михельсоном в 2003 году [5] и разработанная для описания лигандной функции цинк-селективного электрода на кафедре аналитической химии БГУ в 2021 году [6]. Стационарная диффузионная модель мультичастичного приближения позволяет описывать экстракцию металлокомплексов, а также ступенчатую диссоциацию комплексов в водном растворе для моделирования отклика ионоселективных электродов, находящих широкое применение в гематологических исследованиях. В математическую модель входит составление системы уравнений, приведение системы к минимальному количеству уравнений полиномиального вида, анализ полученных уравнений, а также исследование зависимости решения системы от параметров процесса. Значения концентраций, полученные в результате решения системы, позволяют рассчитывать практически значимые характеристики ионоселективных электродов, такие как наклон электродной функции, ширина диапазона функционирования и коэффициенты селективности, а также выполнять построение как двумерных графических зависимостей потенциала, так и трехмерных зависимостей мольной доли от состава раствора.

Применение данной модели в качестве метода решения учебных задач, используемых в образовательном процессе, позволяет ознакомить студентов с

современными способами описания экстракционных и ионообменных равновесий, усовершенствовать навыки владения математическими приемами, а также повысить уровень компетентности при расчетах равновесий в биологических объектах исследования. Для решения задачи необходимо уметь выполнять стандартные математические преобразования, проводить анализ полиномиальных уравнений, владеть навыками решения параметрических уравнений средствами программы Wolfram Mathematica, а также оперировать массивами данных и графическими возможностями компьютерной визуализации.

Литература

1. Самаль, С. А. Высшая математика: учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине для специальностей: 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направления специальности 1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность), 1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность), 1-31 05 01-03 Химия (фармацевтическая деятельность), 1-31 05 01-05 Химия (радиационная, химическая и биологическая защита), 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений, 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия / С. А. Самаль, Н. С. Коваленко, Н. А. Дегтяренко // Учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине – [Электронный ресурс]. – Рег. № УД – 9993/уч. – 2021. – 44 с. – Режим доступа: <https://elib.bsu.by/handle/123456789/271645> – Дата доступа: 09.11.2021.

2. Дегтяренко, Н. А. Математическое моделирование химических процессов: учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине для специальностей: 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия / Н. А. Дегтяренко // Учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине – [Электронный ресурс]. – Рег. № УД – 8171/уч. – 2020. – 30 с. – Режим доступа: <https://elib.bsu.by/handle/123456789/244439> . – Дата доступа: 25.06.2020.

3. Официальный сайт химического факультета МГУ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program> – Дата доступа: 20.12.2021.

4. Батлер, Дж. Н. Ионные равновесия. – Ленинград: Химия, 1973. – 448 с.

5. Михельсон К. Н. Ионоселективные мембраны с двумя видами ионообменных групп: моделирование в рамках многочастичного приближения // Вестник СПбГУ. Сер. 4, 2003. – № 1. – С. 53–65.

6. Егоров, В. В. Теоретическое описание лигандной функции ионоселективных электродов, обратимых к анионным комплексам металлов. 3. Моделирование отклика электрода в растворах лиганда и посторонних ионов в рамках модели многочастичного приближения / В. В. Егоров, А. В. Семёнов, Е. Б. Окаев, А. Д. Новаковский // Журнал Белорусского государственного университета. Химия. – 2021. – № 1. – С. 36–49.