

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным инновациям

 О.Г. Прохоренко

«05» июля 2023 г.

Регистрационный № УД – 12220/уч.



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальностей:**

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направление специальности:

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

1-31 05 03 Химия высоких энергий

1-31 05 04 Фундаментальная химия

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 01-2021 по специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям), ОСВО 1-31 05 03-2021 по специальности 1-31 05 03 Химия высоких энергий, ОСВО 1-31 05 04-2021 по специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия, учебных планов БГУ № G31-01-005уч. от 25.05.2021, № G31-1-071/уч. ин от 31.05.2021, № G31-1-009уч. от 25.05.2021, № G31-1-010уч. от 25.05.2021, №G31-1-231/уч. от 22.03.2022, №G31-1-236/уч. от 22.03.2022, №G31-1-237/уч. от 22.03.2022.

СОСТАВИТЕЛЬ:

О. В. Тимохович, старший преподаватель кафедры общей математики и информатики механико-математического факультета Белорусского государственного университета.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Н. В. Гриб – заведующий кафедрой математики и методики преподавания математики Учреждения образования «Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка», кандидат физико-математических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой общей математики и информатики механико-математического факультета БГУ
(протокол № 12 от 29.06.2023)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 9 от 29.06.2023)

Зав. кафедрой  С. А Самаль

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель и задачи учебной дисциплины

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 компьютерной техники 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.

Основной целью преподавания учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» является подготовка студентов к использованию современного математического аппарата и компьютерных программных средств в качестве эффективных инструментов для решения научных и практических задач в области химии.

Основные задачи преподавания учебной дисциплины:

- придать общему курсу математики для студентов специальностей 1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность), 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия профессиональную направленность;
- привить первичные навыки построения математических моделей химических процессов и реализации этих моделей с помощью современных методик использования компьютера;
- сформировать у студентов умение самостоятельно расширять знания в области математики и компьютерного обеспечения математического моделирования, пользоваться справочной литературой в этих областях в применении к практической и исследовательской работе.

С учетом сформулированных задач построение программы дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» основывается на трех **основных принципах:**

- интеграционный или междисциплинарный подход;
- применение компьютерных технологий;
- усиление роли самостоятельной работы студентов в процессе освоения учебного материала.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Специальность 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направление специальности: 1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

Учебная дисциплина относится к модулю «Основы научного химического эксперимента» компонента учреждения высшего образования.

Специальность 1-31 05 03 Химия высоких энергий

Учебная дисциплина относится к модулю «Радиохимия и радиометрия» компонента учреждения высшего образования.

Специальность 1-31 05 04 Фундаментальная химия

Учебная дисциплина относится к модулю «Математические методы в химии» компонента учреждения высшего образования.

Связи с другими учебными дисциплинами, включая учебные дисциплины компонента учреждения высшего образования, дисциплины специализации и др.

Дисциплина «Математическое моделирование химических процессов» основана на учебных дисциплинах «Высшая математика», «Информационные технологии», «Аналитическая химия». Она необходима для изучения специальных (химических), а также смежных дисциплин, таких как: «Физика», «Общая химическая технология», «Химическая экология», формирующих навыки работы с профессиональной информацией.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» должно обеспечить формирование следующих **специализированных компетенций:**

Специальность 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направление специальности: 1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность), **специальность 1-31 05 04 Фундаментальная химия:**

СК - 5. Применять методы математического анализа, дифференциального исчисления, теории вероятностей, теории статистического оценивания для решения задач химического содержания.

Специальность 1-31 05 03 Химия высоких энергий

СК - 6. Осуществлять подбор детектора и измерительной аппаратуры для

проведения радиометрических измерений и интерпретировать результаты эксперимента, в том числе с привлечением методов математического анализа, теории вероятностей, статистического оценивания.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен

знать:

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

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.

владеть:

- математическим аппаратом матричного исчисления и линейной алгебры для решения задач о составе сложных смесей и прямой задачи

химической кинетики, методами решения алгебраических уравнений и их систем;

- навыками построения и анализа графиков функциональных зависимостей на плоскости и в пространстве при помощи компьютерных средств;
- приложениями математического анализа в химии;
- приложениями численных методов в задачах химического содержания;
- приложениями дифференциальных уравнений и их систем в задачах химической кинетики;
- вероятностно-статистическими методами математической обработки и анализа результатов химического эксперимента.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 5 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» отведено:

- в очной форме получения высшего образования: 94 часа, в том числе – 44 аудиторных часов, из них: лекции – 12 часов, лабораторные занятия (в компьютерных классах) – 26 часов, управляемая самостоятельная работа – 6 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма текущей аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Учебная программа учитывает потребности смежных и специальных дисциплин в математическом образовании студентов и состоит из трех основных разделов: программное обеспечение математического моделирования химических процессов, детерминированные модели химических процессов, вероятностно-статистические модели химических процессов.

Содержание учебного материала структурно представлено тремя основными блоками. В первом блоке дается краткий обзор современных программных средств математического компьютерного моделирования. Здесь же подробнее рассматриваются универсальная техническая компьютерная система Mathematica, разработанная американской компанией Wolfram Research Inc., и табличный процессор Microsoft Excel – составляющий стандартного пакета Microsoft Office. Аргументируем выбор именно этих двух программных средств (далее в тексте для краткости будем использовать соответствующие термины Mathematica и Excel) для реализации задач данного курса.

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. Mathematica позволяет переложить многие громоздкие и трудоемкие аналитические преобразования и вычисления на компьютер и сосредоточиться на проблеме постановки задачи и анализе результатов ее решения. К ее достоинствам также можно отнести обширные графические возможности и специальные приложения.

Табличный процессор Excel в общих чертах изучался студентами на первом курсе в рамках учебной дисциплины «Информационные технологии». Здесь он рассматривается в качестве универсального пакета, позволяющего применять основные методы математической статистики. Возможностей этого процессора вполне достаточно, чтобы решать статистические задачи, предлагаемые на практических занятиях студентам третьего 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.

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.

Второй блок образован рядом математических моделей химических задач, для реализации которых используется универсальная техническая компьютерная система Mathematica. Эти модели сгруппированы по темам 2.1 – 2.5. Третий блок образован рядом статистических моделей химических задач, для реализации которых 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. Статистические модели сгруппированы в третьем блоке по темам 3.1 – 3.4.

РАЗДЕЛ I. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Тема 1.1. Предмет и задачи учебной дисциплины, организационные формы работы. Краткий обзор современных программных средств математического компьютерного моделирования

Предмет и задачи учебной дисциплины, организационные формы работы, структура электронных материалов, рекомендации по работе с ними. Краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы при реализации математического моделирования на компьютере: прикладных математических пакетов (Mathcad, MATLAB, Mathematica), статистических пакетов (STATISTICA, STADIA, SPSS). Интеллектуальный анализ данных, специальные приложения.

Тема 1.2. Табличный процессор Excel (рекомендации по работе с электронной базой учебно-методических материалов)

Табличный процессор Excel: структура книги Excel; построение таблиц и графиков функций; работа с формулами; встроенные функции Excel; встроенные в Пакет анализа подпрограммы.

Тема 1.3. Универсальная техническая компьютерная система Mathematica (рекомендации по работе с электронной базой учебно-методических материалов)

Универсальная техническая компьютерная система Mathematica: основные элементы пакета Mathematica; запуск пакета, работа с программой, выход; получение справочной информации от пакета Mathematica; численные расчеты; символьные вычисления; графика; элементы программирования в пакете Mathematica.

РАЗДЕЛ II. ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Тема 2.1. Методы линейной алгебры в применении к решению химических задач

Расчет смесей сложного состава. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Классический матричный метод в применении к решению прямой кинетической задачи.

Тема 2.2. Элементы исследования функции одной переменной в химических задачах

Исследование влияния щелочи, добавляемой в раствор кислоты, на рН раствора. Химический смысл асимптот графика функции, исследования функции при помощи первой и второй производных, построение графика функции в химических задачах.

Тема 2.3. Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями

Численные методы хорд и касательных для решения нелинейных уравнений. Исследование рН растворов солей и слабых кислот. Задача о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием.

Тема 2.4. Аналитическое и численное интегрирование в химических задачах

Задача о концентрации раствора. Прямая задача химической кинетики: кинетика простых реакций. Процесс ионизации в газовой среде.

Тема 2.5. Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в химических задачах

Радиоактивный распад. Двухстадийные реакции, протекающие в закрытых системах (двусторонние реакции; последовательные реакции; параллельные реакции первого порядка). Простейшая автокаталитическая реакция.

РАЗДЕЛ III. ВЕРОЯТНОСТНО–СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Статистические модели химических задач, для реализации которых на компьютере используется табличный процессор Excel. Во всех задачах этого раздела предполагается использование в качестве исходного статистического материала эмпирических данных, полученных в ходе химического эксперимента с целью исследования некоторого признака (некоторых признаков) рассматриваемого химического процесса. Интерпретация статистических выводов предполагается в терминах химического содержания задачи. Модели сгруппированы по перечисленным ниже темам.

Тема 3.1. Статистические модели химических задач по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания»

Решение обратной задачи химической кинетики.

Тема 3.2. Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые

характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения.

Генеральная и выборочная совокупности. Дискретное статистическое распределение выборки. Эмпирическая функция распределения выборки. Интервальное статистическое распределение выборки. Точечные и интервальные оценки числовых характеристик генеральной случайной величины. Выбраковка результатов химического анализа.

Тема 3.3. Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в химических задачах

Примеры проверки параметрических статистических гипотез в химических задачах. Критерий согласия Пирсона для проверки непараметрических статистических гипотез.

Тема 3.4. Статистические модели химических задач по теме «Корреляция и регрессия»

Корреляционные и регрессионные стохастические зависимости. Основные числовые параметры, характеризующие такие зависимости, их смысл. Линейная корреляция.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы; перечень изучаемых вопросов	Количество аудиторных часов						Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное	Количество часов УСП	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
I.	ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ	3						
1.1.	Предмет и задачи учебной дисциплины, организационные формы работы. Краткий обзор современных программных средств математического компьютерного моделирования Предмет и задачи учебной дисциплины, организационные формы работы, структура электронных материалов, рекомендации по работе с ними. Краткий обзор современных программных средств математического компьютерного моделирования: прикладных математических пакетов (Mathcad, MATLAB, Mathematica), статистических пакетов (STATISTICA, STADIA, SPSS). Интеллектуальный анализ данных, специальные приложения.	1						устный опрос
1.2	Табличный процессор Excel (рекомендации по работе с электронной базой учебно-	1						устный опрос

	методических материалов). Табличный процессор Excel: структура книги Excel; построение таблиц и графиков функций; работа с формулами; встроенные функции Excel; встроенные в Пакет анализа подпрограммы.							
1.3	Универсальная техническая компьютерная система Mathematica (рекомендации по работе с электронной базой учебно-методических материалов). Универсальная техническая компьютерная система Mathematica: основные элементы пакета Mathematica; запуск пакета, работа с программой, выход; получение справочной информации от пакета Mathematica; численные расчеты; символьные вычисления; графика; элементы программирования в пакете Mathematica.	1						устный опрос
II.	ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ				15		3	
2.1	Методы линейной алгебры в применении к решению химических задач. Расчет смесей сложного состава. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Классический матричный метод в применении к решению прямой кинетической задачи.				3		1	контрольное тестирование, письменный отчет по лабораторной работе № 1 (по теме 2.1)
2.2	Элементы исследования функции одной переменной в химических задачах. Исследование влияния щелочи, добавляемой в раствор кислоты, на pH раствора. Химический смысл асимптот графика функции, исследования функции при помощи первой и второй производных, построение графика функции в химических задачах.				3			устный опрос
2.3	Химические равновесия, описываемые				3			письменный

	нелинейными уравнениями. Численные методы хорд и касательных для решения нелинейных уравнений. Исследование рН растворов солей и слабых кислот. Титрование слабой одноосновной кислоты сильным основанием.							отчет по лабораторной работе №2 (по темам 2.2 и 2.3)
2.4	Аналитическое и численное интегрирование в химических задачах. Задача о концентрации раствора. Прямая задача химической кинетики: кинетика простых реакций. Процесс ионизации в газовой среде.				3			устный опрос, реферат
2.5	Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в химических задачах. Радиоактивный распад. Двухстадийные реакции, протекающие в закрытых системах (двусторонние реакции; последовательные реакции; параллельные реакции первого порядка). Простейшая автокаталитическая реакция.				3		2	письменный отчет по лабораторной работе №3 (по темам 2.4 и 2.5), контрольная работа по темам 2.2. – 2.5. реферат
III.	ВЕРОЯТНОСТНО–СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ	9			11		3	
3.1	Статистические модели химических задач по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания». Решение обратной задачи химической кинетики.	2			3		1	устный отчет по лабораторной работе № 4 (теме 3.1)
3.2	Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения.	3			3			устный опрос

	Генеральная и выборочная совокупности. Дискретное статистическое распределение выборки. Эмпирическая функция распределения выборки. Интервальное статистическое распределение выборки. Точечные и интервальные оценки числовых характеристик генеральной случайной величины. Выбраковка результатов химического анализа.							
3.3	Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в химических задачах. Примеры проверки параметрических статистических гипотез в химических задачах. Критерий согласия Пирсона для проверки непараметрических статистических гипотез.	2			3			устный опрос по лабораторной работе № 5 (по темам 3.2 и 3.3)
3.4	Статистические модели химических задач по теме «Корреляция и регрессия». Корреляционные и регрессионные стохастические зависимости. Основные числовые параметры, характеризующие такие зависимости, их смысл. Линейная корреляция.	2			2		2	устный опрос по лабораторной работе № 6 (по теме 3.4), контрольная работа по темам 3.2. – 3.4.

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Буданов, В. В. Химическая кинетика: Учебное пособие. / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин. – Издательство «Лань», 2022. – 288 с.
2. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика: [учебное пособие для студентов вузов] / В. Е. Гмурман. – 12-е изд. – М.: Юрайт, 2023. – 479 с.
3. Дегтяренко, Н.А. Математическая статистика: пособие для студентов химического факультета / Н.А. Дегтяренко, О.Г. Душкевич. – Минск: БГУ, 2008. – 141 с.
4. Жебентяев, А.И. Аналитическая химия. Химические методы анализа: учеб. пособие / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек, И.Е. Талуть. – 2-е изд. – Минск: Новое знание: М.: ИНФРАМ, 2020.– 542 с

Дополнительная литература

5. Баврин, И. И. Высшая математика для химиков, биологов и медиков: учебник и практикум для прикладного бакалавриата/ И. И. Баврин. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Юрайт, 2019. – 397 с.
6. Вершинин, В. И. Аналитическая химия. Учебник для вузов. / В. И. Вершинин, И. В. Власова, И. А. Никифорова. – Издательство «Лань», 2022. – 428 с.
7. Далингер В. А., Симонженков С. Д. Информатика и математика. Решение уравнений и оптимизация в Mathcad и Maple. Учебник и практикум для вузов. М.: Юрайт, 2019. 156 с.
8. Ковалев, М. М. Экономико-математические расчеты в системе МАТНЕМАТИСА: Учеб. пособие для студентов экон. фак. БГУ / Авт.-сост. И. В. Большакова, В. С. Мастяница; Под общ. ред. М. М. Ковалева.– Мн.: БГУ, 2005. – 128 с.
<http://elib.bsu.by/handle/123456789/8146>
9. Коваленко, А. В. Математическое моделирование физико-химических процессов в среде ComsolMultiphysics 5.2: Учебное пособие для вузов / А. В. Коваленко, А. М. Узденова и др. – Издательство «Лань», 2023. – 228 с.
10. Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad / Maple / MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – М.: Горячая линия-телеком, 2009. – 384с.
11. Максимов, С.И. Excel 2013 и SPSS 21 в решении задач прикладной статистики : учеб.-метод. пособие (с электронным приложением) / С.И. Максимов, Е.М. Зайцева. – Серия «Современные информационные технологии». – Минск : РИВШ, 2015. – 132 с.
12. Прокопеня, А.Н. Применение системы Mathematica к решению обыкновенных дифференциальных уравнений / А.Н. Прокопеня, А.В. Чичурин.– Минск: БГУ, 1999. – 265 с.
13. Млодинов Л. (Не)совершенная случайность. Как случай управляет нашей жизнью / Леонард Млодинов. Переводчик Дементиевская Ольга. Редактор Мартынова Шаши. –Livebook, 2019. – 352 с.

14. Скатацкий, В.Г. Математические методы в химии / В.Г. Скатацкий, Д. В. Свиридов, В.И. Яшкин. – Минск: ТетраСистемс, 2006. – 368 с.
15. Скатацкий, В.Г. Лекции по математике для студентов химических специальностей / В.Г. Скатацкий. – Минск: БГУ, 2000. – 387 с.
16. Цацкина Е. П., Царегородцев А. В. Информатика и методы математического анализа. Учебно-методическое пособие. В 2 частях. Часть 1. Информатика. М.: Проспект, 2019. 96 с.

Электронные источники

17. Дегтяренко, Н. А. УМК Математическое моделирование химических процессов для специальностей: 1-31 05 01 «Химия (по направлениям)», направления специализации: 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)», 1-31 05 01-02 «Химия (научно-педагогическая деятельность)» / Н. А. Дегтяренко // Учебно-методический комплекс располагается в коллекциях: Учебно-методические комплексы механико-математического факультета. [Электронный ресурс]. – 2013. – Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/39876>. – Дата доступа: 20.03.2020.
18. Дегтяренко, Н. А. УМК Математическое моделирование химических процессов для специальностей: 1-31 05 01 «Химия», направление специализации: 1-31 05 01-04 «Химия (охрана окружающей среды)» / Н. А. Дегтяренко, Л. А. Шмат // Учебно-методический комплекс располагается в коллекциях: Учебно-методические комплексы механико-математического факультета. [Электронный ресурс]. – 2013. – Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/39877>. – Дата доступа: 20.03.2020.
19. Mathematica – Образовательный математический сайт Exponenta.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: old.exponenta.ru/soft/Mathemat/Mathemat.asp – Дата доступа: 20.03.2020.
20. Ресурсы для изучения Wolfram Language (Mathematica) на русском языке [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habrahabr.ru/company/wolfram/blog/244451/>. Дата доступа: 20.03.2020.
21. Самоучитель по Mathematica [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://lib.qrz.ru/book/export/html/10482> – Дата доступа: 20.03.2020.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Перечень рекомендуемых средств диагностики:

1. Устный или письменный отчет в результате выполнения лабораторной работы.
2. Устный опрос.
3. Контрольные работы.

4. Реферат.
5. Контрольное тестирование.

Оценка за ответы на лабораторных занятиях (опрос) включает в себя полноту ответа, наличие аргументов, примеров из практики и т.д.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущего контроля знаний в итоговую отметку

Формирование отметки за текущую успеваемость:

- устные ответы на лабораторных занятиях, устные и письменные отчеты в результате выполнения лабораторных работ – 50 %;
- контрольная работа, контрольное тестирование – 50 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе отметки текущей успеваемости и отметки на зачете с учетом их весовых коэффициентов. Вес отметки по текущей успеваемости составляет 40 %, отметки на зачете – 60 %.

Для успешной сдачи зачета итоговая отметка по дисциплине должна находиться в интервале от 4 до 10 баллов.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 2.1. Методы линейной алгебры в применении к решению химических задач.

ЗАДАНИЕ № 1

Расчет смесей сложного состава

Требуется приготовить смесь из пяти компонентов (условно назовем их первый – пятый), которая содержала бы пять веществ (I – V) в количествах b_1, b_2, b_3, b_4, b_5 условных единиц соответственно. Сколько условных единиц каждого компонента необходимо взять, если дана матрица

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{pmatrix}$$

и известно, что в одной условной единице j -го

компонента содержится a_{ij} условных единиц i -го вещества ($i = \overline{1,5}; j = \overline{1,5}$).

Запишите в общем виде **четвертое** уравнение полученной в результате моделирования системы линейных алгебраических уравнений. **Поясните словами**, что выражает правая часть этого уравнения, что выражает каждое из слагаемых в левой его части, что взято за неизвестные системы.

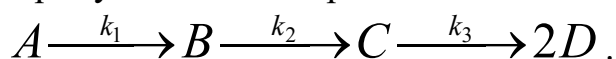
ЗАДАНИЕ № 2

Классический матричный метод

в применении к решению прямой задачи химической кинетики

Пусть дана кинетическая схема трехстадийной реакции и задан в общем виде вектор начальных концентраций веществ, участвующих в реакции. Предполагается, что реакционная схема включает элементарные стадии только первого порядка.

1. Составьте дифференциальную модель прямой задачи химической кинетики.
2. Запишите стехиометрическую матрицу коэффициентов, вектор скоростей элементарных стадий, транспонируйте первую матрицу, умножьте полученный результат на вектор скоростей и сравните полученный результат с результатом п.1.
3. Составьте матрицу констант скоростей.



Форма контроля – контрольное тестирование.

Раздел II. Детерминированные модели химических процессов (темы 2.1 – 2.5).

ЗАДАНИЕ № 1

Выполните следующие пункты с помощью системы Mathematica.

1. Присвойте переменной y значение $y = e^{4x} \cos(x + 1)$, зависящее от x .
2. С помощью оператора подстановки подставьте в данную функцию значение $x=0$. Получите приближенное значение этого результата.
3. Проинтегрируйте введенную функцию в неопределенном смысле.
4. Проинтегрируйте эту функцию в определенном смысле в пределах интегрирования от 2 до 5. Получите приближенное значение этого результата.
5. Возьмите первую и третью производные от функции $y = e^{4x} \cos(x + 1)$.
6. Найдите корень уравнения $y = 0$ на отрезке от 0 до 1. Получите численное приближенное значение результата.
7. Изобразите график функции $y = e^{4x} \cos(x + 1)$ на отрезке от (-1) до 1. Изобразите данный график в диапазоне от (-20) до 20 по оси Oy . Подпишите название рисунка: График функции $y=y(x)$. Подпишите оси и легенду.
8. Сгенерируйте таблицу значений (x,y) , где x меняется от (-1) до 1 с шагом 0,001, а y вычисляется по ранее указанной формуле. Сделайте так, чтобы таблица не отображалась на экране.
9. Создайте интерполяционную функцию по данным вашей таблицы.

10. Изобразите график полученной интерполяционной функции, подпишите легенду.
11. Покажите **на одном рисунке** точечный график значений из таблицы и график непрерывной функции $(-y(x))$, где x принадлежит диапазону от (-1) до 1 , а y – диапазону от (-20) до 20 . Полученные графики должны быть симметричны относительно оси Ox .
12. Очистите значение переменной y .
13. С помощью встроенной функции DSolve найдите аналитическое решение задачи Коши:

$$x'(t) = -5x(t) + 3y(t) - 2e^t$$

$$y'(t) = -x(t) - y(t) - 5e^t$$

$$x(0) = 1$$

$$y(0) = 0$$

14. С помощью встроенной функции NDSolve найдите численное решение задачи Коши на промежутке $t \in [0;10]$:

$$a'(t) = -a(t)b(t)$$

$$b'(t) = -a(t)b(t)$$

$$c'(t) = a(t)b(t) - c(t)$$

$$p'(t) = c(t)$$

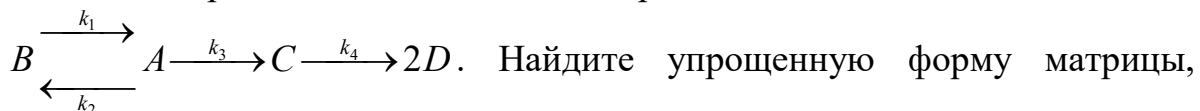
$$a(0) = 1, \quad b(0) = 3, \quad c(0) = 0, \quad p(0) = 0.$$

15. Изобразите графики всех полученных в решении кривых (см. п. 14) на указанном промежутке. Промежуток по оси Oy возьмите от 0 до 1 . Подпишите рисунок: График решения.
16. Возьмите первую производную от полученной в численном решении функции $a(t)$. Изобразите ее график.

ЗАДАНИЕ № 2

При помощи компьютерной системы Mathematica решите задачи:

1. Составьте стехиометрическую матрицу для указанной кинетической модели четырехстадийной химической реакции:



вычислите ее определитель, найдите ранг данной матрицы.

2. Рассмотрите уравнение линии равновесия бинарной смеси из бензола и толуола, зная, что в данном случае применимы законы Рауля и Дальтона:

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x}, \text{ где } x \text{ – мольная доля бензола в жидкости, } y \text{ – мольная}$$

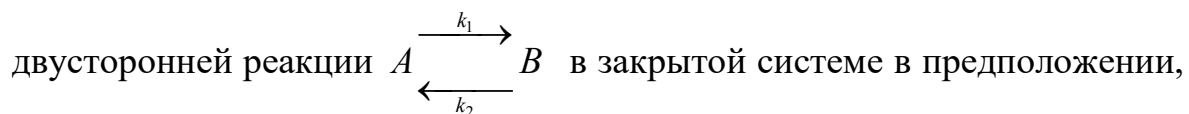
доля бензола в парах над жидкостью, $\alpha = 2,48$ – относительная летучесть.

Исследуйте данную математическую функцию $y = y(x)$ на наличие

вертикальных и наклонных асимптот. Сформулируйте результаты исследования в терминах химического содержания задачи. Приведите график исследуемой функции при $x \in [-10; 10]$.

3. Докажите, что уравнение $\frac{e^x}{x+2} = -1$ имеет только один вещественный корень на промежутке $[-4; -2)$ (здесь предполагается математическое исследование соответствующей функции). Найдите приближенное значение этого корня с недостатком и с избытком (применяя методы хорд и касательных). Дайте графическую иллюстрацию решения.

- 4*. Рассмотрите прямую кинетическую задачу для случая протекания



что прямая и обратная стадии имеют **второй** кинетический порядок. Запишите математическую модель реакции. Считая, что $C_{A0} = 0,4$ моль/л; $C_{B0} = 0,3$ моль/л; $k_1 = 1/10$ л/(моль·с); $k_2 = 3/100$ л/(моль·с), осуществите аналитическое или численное решение этой математической модели при $t \in [0; 20]$. Представьте его графически. Исследуйте на выбранном промежутке полученную текущую концентрацию $C_A(t)$ при помощи первой и второй производных. Сформулируйте выводы в терминах химического содержания задачи.

Форма контроля – контрольная работа по темам 2.2. – 2.5.

Раздел III. Вероятностно-статистические модели химических процессов (темы 3.1 – 3.4).

1. Имеется выборка: 8; 5; 9; 5; 5; 11; 8; 7; 4; 3; 4. Постройте дискретный вариационный и статистический ряды, статистическое распределение, эмпирическую функцию распределения и полигон абсолютных частот по этой выборке. Вычислите выборочное среднее значение выборки, моду, медиану, выборочную статистическую дисперсию выборки, среднее квадратичное отклонение.
2. Дан интервальный статистический ряд, полученный в результате обработки экспериментальных данных, проведенной по изучаемому признаку X :

x_i	[21;25)	[25;29)	[29;33)	[33;37)	[37;41)
m_i	7	19	42	24	8

Выполните следующие пункты.

1. Постройте графики функций $p_n(x), F_n(x)$, сформулируйте непараметрическую гипотезу о виде распределения изучаемой генеральной случайной величины X .
2. Вычислите \bar{x}, S^2, S , доверительные интервалы для неизвестных параметров $M(X), \sigma(X)$ генеральной случайной величины X . Доверительную вероятность примите равной $\gamma = 0,95$. Ответьте на теоретические вопросы: а) как изменятся доверительные интервалы, если увеличить объем выборки при сохранении всех прочих данных задачи?
б) как изменятся доверительные интервалы, если увеличить доверительную вероятность при сохранении всех прочих данных задачи?
- 3*. Проверьте гипотезу о нормальном законе распределения генеральной случайной величины X , пользуясь критерием Пирсона, если $\gamma = 0,95$.
3. Дана таблица, полученная в результате статистической обработки экспериментальных данных, проведенной по паре изучаемых признаков (X, Y) :

$y \setminus x$	0,6	0,65	0,7	0,75
5	6	–	–	–
15	4	7	–	–
25	–	12	4	1
35	–	–	5	10

Выполните следующие пункты.

1. Постройте корреляционное поле.
2. Найдите эмпирическое уравнение линейной регрессии \bar{y}_x . Постройте на корреляционном поле график прямой, имеющей это уравнение, подпишите его.
3. Вычислите следующие статистические показатели: $\bar{A}_x, \mathcal{E}_x, \hat{r}_{x,y}, (\hat{r}_{x,y})^2, t_{\text{набл}}$.
4. Пользуясь результатами вычислений, при уровне значимости $\alpha = 0,05$ проверьте адекватность полученного уравнения линейной регрессии эмпирическим данным.

Форма контроля – устный отчет по теме 3.1; контрольная работа по темам 3.2. – 3.4.

Примерная тематика лабораторных занятий

№	Тема занятия	Вопросы, которые рассматриваются на занятии
1-2	Лабораторная работа № 1. Методы линейной алгебры в применении к решению химических задач. Контрольное тестирование по теме лабораторной работы № 1 (1 ч).	Расчет смесей сложного состава. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Классический матричный метод в применении к решению прямой кинетической задачи.
3-5	Лабораторная работа № 2. Элементы исследования функции одной переменной в химических задачах. Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями.	Исследование влияния щелочи, добавляемой в раствор кислоты, на рН раствора. Химический смысл асимптот графика функции, исследования функции при помощи первой и второй производных, построение графика функции в химических задачах. Численные методы хорд и касательных для решения нелинейных уравнений. Исследование рН растворов солей и слабых кислот. Задача о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием.
6-9	Лабораторная работа № 3. Аналитическое и численное интегрирование в химических задачах. Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в химических задачах.	Задача о концентрации раствора. Прямая задача химической кинетики: кинетика простых реакций. Процесс ионизации в газовой среде. Радиоактивный распад. Двухстадийные реакции, протекающие в закрытых системах (двусторонние реакции; последовательные реакции; параллельные реакции первого порядка). Простейшая автокаталитическая реакция.
10-11	Лабораторная работа № 4. Статистические модели химических задач по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания».	Решение обратной задачи химической кинетики.
12-14	Лабораторная работа № 5. Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения. Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в	Генеральная и выборочная совокупности. Дискретное статистическое распределение выборки. Эмпирическая функция распределения выборки. Интервальное статистическое распределение выборки. Точечные и интервальные оценки числовых характеристик генеральной случайной величины. Выбраковка результатов химического анализа. Примеры проверки параметрических статистических гипотез в химических задачах. Критерий согласия Пирсона для проверки непараметрических статистических гипотез.

	химических задачах.	
15	Лабораторная работа № 6. Статистические модели химических задач по теме «Корреляция и регрессия».	Корреляционные и регрессионные стохастические зависимости. Основные числовые параметры, характеризующие такие зависимости, их смысл. Линейная корреляция.
16	Устный опрос по лабораторной работе № 6 (по теме 3.4)	Статистические модели химических задач по теме «Корреляция и регрессия». Корреляционные и регрессионные стохастические зависимости. Основные числовые параметры, характеризующие такие зависимости, их смысл. Линейная корреляция.

Другая значимая информация

Организация процесса обучения студентов предполагает аудиторную форму работы (лекции, лабораторные занятия в компьютерных классах, консультации) и самостоятельную работу студентов, в том числе УСР. При чтении лекционного курса и проведении лабораторных занятий рекомендуется использование междисциплинарного подхода, применение технических средств обучения для демонстрации приемов работы с программными средствами. Для организации самостоятельной работы студентов предполагается размещение в сетевом доступе комплекса учебных и учебно-методических материалов (программа, краткий лекционный курс, задания к лабораторным работам и методические указания и рекомендации по их выполнению, список рекомендуемой литературы и информационных ресурсов, список вопросов к зачету, справочный материал).

Учебно-методические материалы для выполнения лабораторных работ предоставляются студентам в электронном виде в формате PDF. Аудиторные часы, предусмотренные учебной программой для выполнения лабораторных работ, проводятся только в компьютерных классах при помощи соответствующего программного обеспечения. Эти материалы детально проработаны, т. к. составлены с ориентацией на самостоятельную работу студентов – каждый студент получает индивидуальный вариант для выполнения лабораторной работы и работает за компьютером также индивидуально. Учебно-методический материал для выполнения каждой из лабораторных работ имеет единую структуру:

1. задания к лабораторной работе,
2. список основных встроенных функций, необходимых для выполнения лабораторной работы, с подробным описанием их действий,
3. образцы решения лекционных математических моделей и оформления отчета по лабораторной работе.

Образцы решения лекционных математических моделей и оформления отчета по лабораторной работе представляют собой цельные программные коды рассмотренных лекционных задач по соответствующей теме, снабженные необходимыми краткими комментариями. Эти материалы предоставляются студентам в формате PDF и обеспечивают удобство использования образцов при индивидуальной работе студента за компьютером на лабораторном занятии.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются *эвристический* и *практико-ориентированный подходы*.

Эвристический подход предполагает:

- осуществление студентами лично-значимых открытий окружающего мира;

- демонстрацию многообразия решений большинства профессиональных задач и жизненных проблем;
- творческую самореализацию обучающихся в процессе создания образовательных продуктов;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности.

Практико-ориентированный подход предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- междисциплинарный подход.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Дополнительная управляемая самостоятельная работа проводится в форме реферативной работы (доклада) по темам пунктов 2.4, 2.5. При оценивании реферата (доклада) обращается внимание на содержание и полноту раскрытия темы, структуру и последовательность изложения, источники и их интерпретацию, корректность оформления и т.д.

На выполнение заданий этого типа дается время три-четыре недели. Защита реферата производится на лекциях.

Примерный перечень реферативных работ

1. Простая реакция первого порядка в реакторе идеального смешения
2. Пример кинетического моделирования с использованием кусочно-непрерывной функции
3. Метод конечных разностей
4. Краевые задачи диффузионных процессов и распределения температуры
5. Моделирование динамики молекулярных систем
6. Переходной режим в системе из нескольких проточных реакторов идеального смешения

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Основные этапы математического моделирования химического процесса.
2. Расчет смесей сложного состава.
3. Классический матричный метод в прямой кинетической задаче.
4. Методы хорд и касательных.
5. Определение рН водного раствора соли (на примере задачи о соли уксусной кислоты).
6. Определение рН водного раствора слабой одноосновной кислоты.
7. Кинетика простых реакций: случаи моно-, би- и тримолекулярных реакций с участием одного реагента.
8. Кинетика простых реакций: случай реакции с участием двух реагентов, когда их начальные концентрации совпадают (не совпадают).
9. Математическое моделирование химических реакций по их кинетическим схемам с учетом принципа независимости протекания химических реакций.
10. Обратимые реакции. Математическое моделирование обратимой реакции первого порядка.
11. Математическое моделирование двусторонней реакции второго порядка.
12. Последовательные реакции. Математическое моделирование последовательной реакции первого порядка. Случай нулевых начальных концентраций промежуточного и окончательного продуктов реакции.
13. Последовательные реакции. Математическое моделирование последовательной реакции первого порядка. Случай ненулевых начальных концентраций промежуточного и окончательного продуктов реакции.
14. Примеры математического моделирования последовательных реакций второго порядка.
15. Параллельные реакции. Математическое моделирование параллельной реакции первого порядка. Случай нулевых начальных концентраций продуктов реакции.
16. Параллельные реакции. Математическое моделирование параллельной реакции первого порядка. Случай ненулевых начальных концентраций продуктов реакции.
17. Метод наименьших квадратов. Частный случай применения метода наименьших квадратов (для линейной зависимости).
18. Частный случай применения метода наименьших квадратов для полиномиальной зависимости (на примере квадратичной зависимости).

19. Суть метода выравнивания и примеры его применения при решении обратной задачи химической кинетики.
20. Генеральная и выборочная совокупности. Определения случайной, повторной, бесповторной, репрезентативной выборок. Способы случайного отбора.
21. Дискретный статистический ряд: вариационный и статистический ряды, полигон, эмпирическая функция распределения.
22. Интервальный статистический ряд: метод Стерджесса, полигон, гистограмма.
23. Числовые характеристики выборки: выборочное среднее значение выборки, выборочная статистическая дисперсия (исправленная и неисправленная), стандартное отклонение.
24. Числовые характеристики выборки: мода, медиана, начальные и центральные моменты r -го порядка.
25. Точечные и интервальные оценки параметров распределения и основные требования, предъявляемые к ним.
26. Выборочное среднее значение как точечная оценка для математического ожидания случайной величины.
27. Выборочная статистическая дисперсия как точечная оценка для дисперсии случайной величины. Оценка S^2 как несмещенная оценка дисперсии случайной величины.
28. Доверительный интервал, доверительная вероятность, уровень значимости. Формула доверительного интервала для математического ожидания нормально распределенной случайной величины в случае, когда ее дисперсия известна.
29. Предельная ошибка и необходимый объем выборки.
30. Формула доверительного интервала для математического ожидания нормально распределенной случайной величины в случае, когда ее дисперсия неизвестна.
31. Применение χ^2 - распределения для построения доверительных интервалов для дисперсии и среднего квадратичного отклонения нормально распределенной случайной величины в случае, когда математическое ожидание неизвестно.
32. Статистические гипотезы и их виды. Статистические критерии. Ошибки первого и второго родов при принятии статистических гипотез. Мощность критерия.
33. Общая схема статистических критериев.
34. Примеры проверки параметрических и непараметрических статистических гипотез. Критерий Пирсона.
35. Корреляционное поле. Стохастическая и корреляционная зависимости. Регрессия.
36. Линейная корреляция. Некоторые числовые показатели, позволяющие оценить качество уравнений линейной регрессии.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Строение вещества	Кафедра неорганической химии	нет	Вносить изменения не требуется (протокол № 12 от 29.06.2023)
Квантовая химия и строение молекул	Кафедра неорганической химии	нет	Вносить изменения не требуется (протокол № 12 от 29.06.2023)
Физическая химия	Кафедра физической химии	нет	Вносить изменения не требуется (протокол № 12 от 29.06.2023)

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ

на _____ / _____ учебный год

№№ пп	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (название кафедры) (протокол № ____ от _____ 20 г.)

Заведующий кафедрой

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

(И. О. Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

(И. О. Фамилия)