

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

А.Д.Король

27 июня 2025 г.

Регистрационный № 4151/б.н.



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальностей:

6-05-0531-01 Химия

Профилизации:

Зеленые химические технологии функциональных материалов и систем
Химико-аналитическая и экспертная деятельность

7-07-0531-01 Фундаментальная химия

7-07-0531-02 Химия высоких энергий

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 6-05-0531-01-2023, ОСВО 7-07-0531-01-2023, ОСВО 7-07-0531-02-2023; учебных планов БГУ № 6-5.5-41/01 от 15.05.2023, № 6-5.5-41/03 от 15.05.2023, № 7-5.5-68/01 от 15.05.2023, № 7-5.5-69/01 от 15.05.2023.

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:

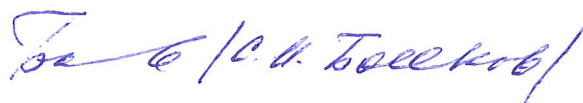
Кафедрой общей математики и информатики БГУ
(протокол № 13 от 25.06.2025);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий 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 **6-05-0531-01 «Химия», 7-07-0531-02 «Химия высоких энергий», 7-07-0531-01 «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 6-05-0531-01 «Химия» профилизация «Зеленые химические технологии функциональных материалов и систем». Учебная дисциплина относится **к модулю** «Математические методы в химии» компонента учреждения образования.

Специальность 6-05-0531-01 «Химия» профилизация «Химико-аналитическая и экспертная деятельность». Учебная дисциплина относится **к модулю** «Основы научного химического эксперимента» компонента учреждения образования.

Специальность 7-07-0531-02 «Химия высоких энергий». Учебная дисциплина относится **к модулю** «Радиохимия и радиометрия» компонента учреждения образования.

Специальность 7-07-0531-01 «Фундаментальная химия». Учебная дисциплина относится **к модулю** «Математические методы в химии» компонента учреждения 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 компетенций:

Специальность 6-05-0531-01 «Химия», профилизации «Зеленые химические технологии функциональных материалов и систем», «Химико-аналитическая и экспертная деятельность», **специальность 7-07-0531-01 Фундаментальная химия:**

Специализированные компетенции:

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

Специальность 7-07-0531-02 Химия высоких энергий:

Специализированные компетенции:

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.

иметь навык:

- использования математического аппарата матричного исчисления и линейной алгебры для решения задач о составе сложных смесей и прямой задачи химической кинетики, методов решения алгебраических уравнений и их систем;

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

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 5 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» отведено для очной формы получения высшего образования: 90 часов, в том числе – 44 аудиторных часов, лекции – 12 часов, лабораторные занятия (в компьютерных классах) – 32 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной 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 1. 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 2. 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 3. 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	Количество аудиторных часов						Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное	Количество часов УСР	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	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	1						устный опрос
1.2	Табличный процессор Excel (рекомендации по работе с электронной базой учебно-методических материалов).	1						устный опрос
1.3	Универсальная техническая компьютерная система Mathematica (рекомендации по работе с электронной базой учебно-методических материалов).	1						устный опрос
2.	ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ				18			
2.1	Методы линейной алгебры в применении к решению химических задач.				4			Отчет по лабораторной работе №1
2.2	Элементы исследования функции одной переменной в химических задачах.				4			устный опрос

2.3	Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями.				4			Отчет по лабораторной работе №2)
2.4	Аналитическое и численное интегрирование в химических задачах.				4			устный опрос
2.5	Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в химических задачах.				2			Отчет по лабораторной работе №3
3.	ВЕРОЯТНОСТНО–СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ	9			14			
3.1	Статистические модели химических задач по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания».	2			4			Отчет по лабораторной работе № 4
3.2	Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения.	3			4			устный опрос
3.3	Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в химических задачах.	2			2			Отчет по лабораторной работе № 5
3.4	Статистические модели химических задач по теме «Корреляция и регрессия».	2			4			устный опрос по лабораторной работе № 6

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. Жебентяев А.И. (Витебский государственный медицинский университет). Аналитическая химия. Химические методы анализа: Учебное пособие / Витебский государственный медицинский университет. – 2-е изд. – Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2026. – 542 с. – URL: https://library.bsu.by/MegaPRO/UserEntry?Action=Link_FindDoc&id=872387&idb=2
4. 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.

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. Дегтяренко, Н.А. Математическая статистика: пособие для студентов химического факультета / Н.А. Дегтяренко, О.Г. Душкевич. – Минск: БГУ, 2008. – 141 с.
9. Химическая кинетика: учебно-методическое пособие / А. В. Крылов, С. С. Москвичев, М. А. Шпынева [и др.]. — Москва : РТУ МИРЭА, 2024. — 54 с. — ISBN 978-5-7339-2393-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/464687>
10. Мельситова, И. В. Аналитическая химия: учебное пособие / И. В. Мельситова, Е. Г. Рагойжа. — Минск : Вышэйшая школа, 2024. — 335 с.
11. Скатецкий, В.Г. Математические методы в химии / В. Г. Скатецкий, Д. В. Свиридов, В. И. Яшкин. – Минск: ТетраСистемс, 2006. – 368 с.
12. Скатецкий, В.Г. Лекции по математике для студентов химических специальностей / В.Г. Скатецкий. – Минск: БГУ, 2000. – 387 с.

13. 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

14. 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.

15. 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.

16. Mathematica – Образовательный математический сайт Exponenta.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: old.exponenta.ru/soft/Mathemat/Mathemat.asp – Дата доступа: 20.03.2020.

17. Ресурсы для изучения WolframLanguage (Mathematica) на русском языке [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habrahabr.ru/company/wolfram/blog/244451/>. Дата доступа: 20.03.2020.

18. 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. Отчет о результате выполнения лабораторной работы.
2. Устный опрос.

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

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов» учебным планом предусмотрен зачёт.

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

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.	Расчет смесей сложного состава. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Классический матричный метод в применении к решению прямой кинетической задачи.
3-6	Лабораторная работа № 2. Элементы исследования функции одной переменной в химических задачах. Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями. Титрование	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. Численные методы хорд и касательных для решения нелинейных уравнений. Исследование pH растворов солей и слабых кислот. Задача о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием.
7-9	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 химических задачах.	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. Выбросы результатов химического анализа. Примеры проверки параметрических статистических гипотез в химических задачах. Критерий согласия Пирсона для проверки непараметрических статистических гипотез.
15-16	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.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

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

Эвристический подход предполагает:

- осуществление студентами личностно-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

Организация процесса обучения студентов предполагает аудиторную форму работы (лекции, лабораторные занятия в компьютерных классах, консультации) и самостоятельную работу студентов. 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.

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 pH водного раствора соли (на примере задачи о соли уксусной кислоты).
6. Определение pH 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 УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой
общей математики и информатики
д.э.н., профессор



С.А.Самаль

25.06.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ

на ____/____ учебный год

№№ пп	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
