

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНИКА»

Факультет/інститут природничих наук

Кафедра хімії

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Математичне моделювання в хімії

Освітня програма Хімія

Спеціальність 102 «Хімія»

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри
Протокол № 1 від “28” серпня 2019 р.

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Результати навчання (компетентності)
5. Організація навчання курсу
6. Система оцінювання курсу
7. Політика курсу
8. Рекомендована література.

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Математичне моделювання в хімії
Викладач (-і)	проф. Сіренко Геннадій Олександрович
Контактний телефон викладача	0681894027
Е-mail викладача	skladanyuk16@gmail.com
Формат дисципліни	Лекції, практичні роботи, самостійна робота
Обсяг дисципліни	3 кредити, 90 годин
Посилання на сайт дистанційного навчання	http://www.d-learn.pu.if.ua/index.php?
Консультації	
2. Анотація до курсу	
Дисципліна «Математичне моделювання в хімії» вивчається студентами спеціальності «Хімія» у другому семестрі магістратури. Предмет має на меті представити студентам засади наукової діяльності в галузі хімії та підготувати студента до захисту бакалаврської роботи.	
3. Мета та цілі курсу	
Мета: ознайомити з теоретичними та практичними питаннями статистичної оцінки одержаних результатів вимірювання, методів моделювання та оптимізації експерименту в хімії та хімічній технології, навчити виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку в хімічних дослідженнях, сформувати вміння прогнозувати властивості досліджуваних функцій відгуку.	
Завдання:	
<ul style="list-style-type: none">• ознайомити з процедурою статистичної оцінки одержаних результатів вимірювання, методів моделювання та оптимізації експерименту в хімії та хімічній технології;• навчити виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку в хімічних дослідженнях;• розглянути теоретичні основи дисперсійної, комбінаторної, кореляційної та регресійної аналіз;• навчити прогнозувати властивості досліджуваних функцій відгуку.	
У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен	
знати:	
<ul style="list-style-type: none">• означення статистичних гіпотез;• закони розподілу випадкової величини;• означення величин і характеристик математичних методів аналізу;• суть дисперсійного, комбінаторного, кореляційного та регресійного аналізу;• процедури розрахунків в математичних методах аналізу;• процедуру аналізу математичних моделей;• процедуру пошуку оптимальних рішень.	
вміти:	

- здійснювати статистичну обробку одержаних результатів вимірювання; будувати довірчі інтервали;
- встановлювати рівень значущості (рівень помилки) для одержаних статистичних оцінок;
- доводити статистичні гіпотези;
- робити розрахунки за математичними формулами;
- аналізувати математичні моделі;
- користуватися статистичними таблицями;
- використовувати сумісні плани дисперсійного та комбінаторного аналізу;
- визначати залежність функції відгуку від вихідних параметрів;
- виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку;
- в умовах виробничої діяльності, використовуючи закони розподілу випадкової величини, обчислювати її числові характеристики;
- в умовах виробничої діяльності за розподілом неперервної випадкової величини розраховувати ймовірність випадкової події, використовуючи математичний апарат теорії випадкових чисел;
- в умовах виробничої діяльності обчислювати числові характеристики двовимірної випадкової величини, розподіленої за заданими законами, використовуючи математичний апарат теорії випадкових чисел;
- в умовах виробничої діяльності розрахувати числові характеристики для заданої вибіркової сукупності, використовуючи математичний апарат теорії випадкових чисел;
- для вибірки з нормального розподілу визначати довірчий інтервал генеральної середньої з заданою довірчою ймовірністю, використовуючи математичний апарат теорії випадкових чисел;
- в умовах виробничої діяльності, використовуючи метод найменших квадратів, розв'язувати задачі регресійного та дисперсійного аналізу
- здійснювати пошук оптимальних рішень..

4. Компетентності

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 3. Здатність працювати у команді.

ЗК 4. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Фахові компетентності спеціальності (ФК):

ФК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

ФК 2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

ФК 4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

ФК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

ФК 8. Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.

5. Результати навчання

Очікувані програмні результати навчання (ПРН):

ПРН1. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.

ПРН2. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших

результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.

ПРН7. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.

ПРН8. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.

ПРН9. Планувати та виконувати хімічний експеримент, застосовувати придатні методики та техніки приготування розчинів та реагентів.

ПРН10. Застосовувати основні принципи термодинаміки та хімічної кінетики для вирішення професійних завдань.

ПРН13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.

ПРН 15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.

ПРН17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.

ПРН25. Оцінювати та мінімізувати ризики для навколишнього середовища при здійсненні професійної діяльності.

6. Організація навчання курсу

Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
Лекції	20
Практичне заняття	10
Самостійна робота	60

Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / Вибірковий
Шостий	102 «Хімія»	Третій	Нормативний

Тематика курсу

Тема	Форма заняття	Літера-тура	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Генеральні і вибірккові сукупности. Функція і щільність ймовірности розподілу.	Лекція	[1-14]	2 год Самостійна робота: 6 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 2. Закони розподілу неперервних випадкових величин. Нормальний закон розподілу Гаусса. Практичне заняття 1.	Лекція, практичне заняття	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота: 6 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 3. Дисперсійна аналіза. Порівняння двох рядів вимірювання. Статистична рівність ряду дисперсій та середніх. Практичне заняття 2.	Лекція, практичне заняття	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота: 8 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 4. Неповні класифікації дисперсійної аналізи. Вихідні положення	Лекція, практичне	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом

комбінаторної аналізи. Практичне заняття 3.	заняття		робота:8 год		
Тема 5. Кореляційна аналіза. Практичне заняття 4.	Лекція, практичне заняття	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:8 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 6. Регресійна аналіза. Практичне заняття 5.	Лекція, практичне заняття	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:8 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 7. Математичне планування експерименту.	Лекція	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:6 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 8. Математичне планування другого порядку.	Лекція	[1-14]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:6 год	Максимальна оцінка – 5 б	за розкладом
Тема 9. Пошук оптимальних рішень.	Лекція	[1-14]	4 год. Самостійна робота:6 год		

6. Система оцінювання курсу

Загальна система оцінювання курсу	Екзамен: максимальна оцінка – 100 балів. Допуск– 50 балів. Екзаменаційна робота – 50 балів
Умови допуску до підсумкового контролю	Робота на заняттях, усні доповіді. Відвідування більше 50% лекційних занять

7. Політика курсу

- Студент повинен вільно володіти матеріалом.
- Лекційні заняття не відпрацьовуються, але знання лекційного матеріалу обов'язкове.
- Обов'язковим для отримання заліку є відвідування більше 50% занять, підготовка усних доповідей, а також виконання самостійної роботи.

8. Рекомендована література

1. Волощенко А.Б. Теорія ймовірностей та математична статистика: навч.-метод. посібник для самот. вивчення дисц. [для студ. економ. спеціал. вищ. навч. заклад.] / А.Б. Волощенко, І.А. Джалладова; [Мін-во освіти і науки України; гриф: лист № 14 / 18.2-613 від 22.03.2002 р.]. – К.: Київ. Нац. економ. ун-т, 2003. – 256 с.: іл., табл. – Приклади розв. завдань і вправи для самот. розв'язання в кінці розд. – Блочно-модул. контроль: с. 183 – 203 (9 варіантів). – Відповіді: с. 204 – 216. – Бібліогр.: с. 217 (18 назв). – Додатки: с. 218 – 254 (8 табл.). – ISBN 966 – 574 – 459– 3.
2. Жлуктенко В.І. Теорія ймовірностей і математична статистика: навч.-метод. посібник [для студ. економ. вищ. навч. заклад.]: У 2-х ч. – Ч. II. Математична статистика / В.І. Жлуктенко, С.І. Наконечний, С.С. Савіна; [Мін-во освіти і науки України; гриф: лист № 14 / 18.2-183 від 27.02.2001 р.]. – К.: Київ. нац. економ. ун-т, 2001. – 336 с.: іл., табл. – Теор. запит. та завдання до теми в кінці теми. – Лаб. роб. після тем 14, 15. – Додатки: с. 242 – 246, 292 – 331. – Бібліогр.: с. 246 (4 назви). – ISBN 966–574–265 – 5.
3. Іванюта І.Д. Елементи теорії ймовірностей та математичної статистики: навч. посібник [для студ. економ. спеціал. вищ. навч. заклад.] / І.Д. Іванюта, В.І. Рибалка, І.А. Рудоміно-Дусятська; [Мін-во освіти і науки України; гриф: лист № 14 / 18.2-271 від 11.02.2003 р.]. – К.: Слово, 2003. – 271 с.: іл., табл. – Завдання до самостійн. роботи: с. 235 – 261 (15 завд.). – Додатки: с. 262 – 267 (6 табл.). – Бібліогр.: с. 268 (6 назв). – ISBN 966 –

8407 – 01 – 6.

4. Неділько С.А. Математичні методи в хімії: підручник [для студ. хім. спеціал. вищ. навч. закладів] / Сергій Неділько; [Мін-во освіти і науки України; гриф: лист № 1 / 11-1536 від 13.04.2004 р.]. – К.: Либідь, 2005. – 256 с.: іл. – Завдання для самостійн. роботи та бібліогр. в кінці розд. – ISBN 966 – 06 – 03843.
5. Солтис М.М., Закордонський В.П. Теоретичні основи процесів хімічної технології. – Львів: Видавн. центр Львів. нац. ун-ту імені Івана Франка, 2003. – 430с.: іл. (80 рис.). – 36 табл. – 1.3. Методи математичної статистики: С.24-46. – 6.6. Дослідження хіміко-технологічного процесу з використанням методів кореляційного та регресійного аналізу: С. 381-405. – Додатки. Статистичні табл.: С.406-410 (4 табл.). – Бібліогр.: С. 413-415 (40 назв). – Предмет. покажчик: С.416-423. – Умов. познач.: С.424-426. – ISBN 966-613-161-7.
6. Адлер Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский. – 2-е изд., перераб. и допол. – М.: Наука, 1976. – 280 с.: ил., табл.–Бібліогр. в конце гл.
7. Ахназарова С.Л. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – М.: Высш. шк., 1978. – 320 с.: ил., табл. – Бібліогр.: с. 302 – 303 (53 наимен.). – Приложения: с. 304 – 317 (14 табл.).
8. Бендат Дж.С. Измерение и анализ случайных процессов / Дж.С. Бендат, А.Г. Пирсол; пер. с англ. Г.В.Матушевского, В.Е.Привальского; под ред. И.Н.Коваленко. – М.: Мир, 1971. – 408 с. – Перевод за изд.: Measurement and analysis of random data / Julius S. Bendat, Allan G. Piersol. – John Wiley and Sons, Inc. – New York-London-Sydney, 1967.: ил., табл. – Предмет. указатель: с. 403-408. – Бібліогр.: с. 400-402 (59 наименов.).
9. Бондар А.Г., Статюха Г.А. Планирование эксперимента в химической технологии. – К.: Вища шк., 1976. – 220с.
10. Горский В.Г., Адлер Ю.П., Талалай А.М. Планирование промышленных экспериментов (модели динамики). – М.: Металлургия, 1974. – 112с.
11. Дэниел К. Применение статистики в промышленном эксперименте / Кутберт Дэниел; пер. с англ. под ред. Э.К. Лецкого. – М.: Мир, 1979. – 301 с. – Перевод за изд.: Applications of statistics to industrial experimentation / Cuthbert Daniel. – John Wiley and Sons. – New York-London-Sydney-Toronto, 1976.: ил., табл. – Бібліогр.: с. 289 – 292 (92 наим.). – Предмет. указатель: с. 293 – 294. – Приложения в конце гл.
12. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. – М.: Химия, 1978. – 376с.
13. Зажигаев Л.С. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента / Л.С. Зажигаев, А.А. Кишьян, Ю.И. Романиков. – М.: Атомиздат, 1978. – 232 с.: ил., табл. – Приложение: с. 144-229 (16 табл.). – Бібліогр.: с. 230-231.
14. Кассандрова О.Н. Обработка результатов наблюдений: Учеб. пособие [для студ. высш. учеб. завед.] / О.Н. Кассандрова, В.В. Лебедев. – М.: Наука, 1970. – 104 с.: ил., табл. – Бібліогр.: с. 103 – 104 (28 наимен.). – Приложения: с. 91 – 102 (6 табл.).

Викладач _____ Г.О. Сіренко