

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

Факультет природничих наук

Кафедра хімії

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ**

Освітня програма бакалавра

Спеціальність 102 Хімія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри  
Протокол № 1 від “25” серпня 2020 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

<b>1. Загальна інформація</b>	
<b>Назва дисципліни</b>	Математичне моделювання в хімії
<b>Викладач (-і)</b>	Професор Сіренко Геннадій Олександрович
<b>Контактний телефон викладача</b>	0681894027
<b>Е-mail викладача</b>	<a href="mailto:skladanyuk16@gmail.com">skladanyuk16@gmail.com</a>
<b>Формат дисципліни</b>	Лекції, практичні заняття, самостійна робота
<b>Обсяг дисципліни</b>	3 кредити, 90 годин
<b>Посилання на сайт дистанційного навчання</b>	<a href="https://d-learn.pnu.edu.ua">https://d-learn.pnu.edu.ua</a>
<b>Консультації</b>	Щотижня
<b>2. Анотація до курсу</b>	
Дисципліна «Математичне моделювання в хімії» вивчається студентами спеціальності «Хімія» у шостому семестрі бакалаврату. Предмет має на меті представити студентам засади наукової діяльності в галузі хімії та підготувати студента до захисту бакалаврської роботи.	
<b>3. Мета та цілі курсу</b>	
<p><b>Мета:</b> ознайомити з теоретичними та практичними методами моделювання та оптимізації експерименту в хімії та хімічній технології, навчити виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку в хімічних дослідженнях, сформулювати вміння прогнозувати властивості досліджуваних функцій відгуку.</p> <p><b>Завдання:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• ознайомити з процедурою статистичної оцінки одержаних результатів вимірювання, методів моделювання та оптимізації експерименту в хімії та хімічній технології;</li> <li>• навчити виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку в хімічних дослідженнях;</li> <li>• розглянути теоретичні основи дисперсійної, комбінаторної, кореляційної та регресійної аналіз;</li> <li>• навчити прогнозувати властивості досліджуваних функцій відгуку.</li> </ul> <p>У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен</p> <p><b>знати:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• означення статистичних гіпотез;</li> <li>• закони розподілу випадкової величини;</li> <li>• означення величин і характеристик математичних методів аналізу;</li> <li>• суть дисперсійного, комбінаторного, кореляційного та регресійного аналізу;</li> <li>• процедури розрахунків в математичних методах аналізу;</li> <li>• процедуру аналізу математичних моделей;</li> <li>• процедуру пошуку оптимальних рішень;</li> </ul> <p><b>вміти:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• здійснювати статистичну обробку одержаних результатів вимірювання, будувати довірчі інтервали;</li> <li>• встановлювати рівень значущості (рівень помилки) для одержаних статистичних оцінок;</li> <li>• доводити статистичні гіпотези;</li> <li>• робити розрахунки за математичними формулами;</li> <li>• аналізувати математичні моделі;</li> <li>• користуватися статистичними таблицями;</li> <li>• використовувати сумісні плани дисперсійного та комбінаторного аналізу;</li> <li>• визначати залежність функції відгуку від вихідних параметрів;</li> <li>• виявляти значущість впливу факторів на функцію відгуку;</li> <li>• в умовах виробничої діяльності, використовуючи закони розподілу випадкової</li> </ul>	

- 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. Результати навчання (компетентності)

##### Загальні компетентності (ЗК):

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність працювати у команді.

ЗК4. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

##### Спеціальні (фахові) компетентності (СК):

СК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

СК2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

СК4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

СК5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

СК8. Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.

##### Програмні результати навчання (ПРН):

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.

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

ПРН15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.

ПРН 17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.

#### 5. Організація навчання курсу

##### Обсяг курсу

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

Ознаки курсу					
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)		Нормативний / Вибірковий	
<b>Шостий</b>	<b>102 «Хімія»</b>	<b>Третій</b>		Нормативний	
Тематика курсу					
Тема	Форма заняття	Літера- тура	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Генеральні і вибіркові сукупності. Функція і щільність ймовірності розподілу.	Лекція	[1-5]	2 год Самостійна робота: 6 год		за розкладом
Тема 2. Закони розподілу неперервних випадкових величин. Нормальний закон розподілу Гаусса.	Лекція, практи чне заняття	[1-5]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:6 год	Максималь на оцінка – 10 б	за розкладом
Тема 3. Дисперсійний аналіз. Порівняння двох рядів вимірювання. Статистична рівність ряду дисперсій та середніх.	Лекція, практи чне заняття	[1-5]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:8 год	Максималь на оцінка – 10 б	за розкладом
Тема 4. Неповні класифікації дисперсійного аналізу. Вихідні положення комбінаторного аналізу.	Лекція, практи чне заняття	[1-5]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:6 год	Максималь на оцінка – 10 б	за розкладом
Тема 5. Кореляційний аналіз.	Лекція, практи чне заняття	[1-5]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:8 год	Максималь на оцінка – 10 б	за розкладом
Тема 6. Регресійний аналіз.	Лекція, практи чне заняття	[1-5]	2 год. / 2 год. Самостійна робота:8 год	Максималь на оцінка – 10 б	за розкладом
Тема 7. Математичне планування експерименту.	Лекція	[1-5]	2 год. Самостійна робота:6 год		за розкладом
Тема 8. Математичне планування другого порядку.	Лекція	[1-5]	2 год. Самостійна робота:6 год		за розкладом
Тема 9. Пошук оптимальних рішень.	Лекція	[1-5]	4 год. Самостійна робота:6 год		за розкладом
6. Система оцінювання курсу					
Загальна система оцінювання курсу	Екзамен: максимальна оцінка – 100 балів. Допуск– 50 балів. Екзаменаційна робота – 50 балів				
Практичні заняття	За практичні заняття – максимум 10 балів за кожне заняття і в підсумку максимально 50 балів до допуску.				
Умови допуску до підсумкового контролю	Робота на заняттях, усні доповіді. Відвідування більше 50% лекційних занять				
7. Політика курсу					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Студент повинен вільно володіти матеріалом.</li> </ul>					

- Лекційні заняття не відпрацьовуються, але знання лекційного матеріалу обов'язкове.
- Обов'язковим для складання іспиту 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 самост. 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 самост. 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.

**Викладач \_\_\_\_\_ Г.О. Сіренко**