

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет: хімічний
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

«Затверджено»

На засіданні кафедри фізичної
та колоїдної хімії Львівського
національного університету
протокол № 1
від 31.08 2022р.

Завідувач кафедри фізичної
та колоїдної хімії



О. РЕШЕТНЯК

СИЛАБУС З НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
«Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії»

Освітньо професійна програма

«Хімія»

Першого (бакалаврського) рівня вищої освіти За спеціальністю 102-Хімія

Галузь знання 10 Природничі науки

Кваліфікація: Бакалавр хімії

Львів 2022

**Силабус курсу «Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії»
2022 -2023 навчального року**

Назва курсу	Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії
Адреса викладання курсу	Вул.. Кирила і Мефодія 6 хімічний факультет, ауд. №3.
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10. Природничі науки, 102 хімія.
Викладачі курсу	Дутка Володимир Степанович, доктор хімічних наук, доцент, професор
Контактна інформація викладачів	vdutka@ukr.net
Консультації по курсу відбуваються	Щосереди 14:00-16:50 год. (вул.. Кирила і Мефодія, ауд. 122) Консультації в день проведення лекцій занять (за попередньою домовленістю).
Сторінка курсу	
Інформація про курс	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання, обов'язкові для того, щоб вміти моделювати різні процеси. Тому у курсі представлено як огляд концепцій математичного моделювання, так і процесів та інструментів, які потрібні для реалізації різноманітних задач з моделювання. .
Коротка анотація курсу	Дисципліна « Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії » є завершальною вибірковою дисципліною з спеціальності 102-Хімія, яка викладається в 8 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Мета та цілі курсу	Метою вивчення вибіркової дисципліни « Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії » є ознайомлення студентів із завданнями оптимізації та моделювання в хімії та хімічній технології для оволодіння сучасними підходами та інструментами для їх вирішення..
Література для вивчення дисципліни	Основна література: оптимальна кількість джерел основної літератури – 3-5 базових підручників та посібників, необхідні нормативно-правові акти, стандарти. (Практично більша половина фахових дисциплін, забезпечена власними посібниками викладачів кафедри). Додаткова література: (список додаткової літератури може включати 10-15 джерел). Додаються також інтернет-джерела. Література 1. Солтис М.М., Закордонський В.П. Математичне моделювання в хімії та хімічній технології.- Львів Вид.центр ЛНУ 2011 328 с. 2. Батунер Л. М., Позин М.Е. Математичні методи в хімічній техніці Л. Хімія 1971 – с.824. 3. Піх З.Г. Теорія хімічних процесів органічного синтезу.- Львів. Вид-во Львівської політехніки 2002.- 396. с. 4. Рудацький Ю.К., Мокрий Є.М., Піх З.Г., Курляк І.Й. Математичні методи в хімії та хімічній технології.- Львів.- Світ. 1993 – 206. с. 5. Солтис М.М., Закордонський В.П. Теоретичні основи процесів хімічної технології.- Львів Вид. центр ЛНУ. 2003. – 430 с. 6. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. К. Либідь. 2005. – с.254.

	<p>Додаткова література</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Хвищун І.О. Програмування і математичне моделювання.-Вид. центр ЛНУ. К.-2007.- 543.. 2. Кафаров В.В. Методи кібернетики в хімії хімічній технології.- М: Химия. 1976.- 484 с. 3. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Хімічна кінетика катализ. М: Химия 1985. – 592 с. 4. Бондар А.Г. Математичне моделювання в хімічній технології. К.: Виша шк. 1973. -279 с. <p>Інтернет ресурси</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. www.elsevier.com 2. www.wiley.com 3. http://pubs.acs.org/ 4. http://chemetal-journal.org/ 5. http://chem.lnu.edu.ua/visnykk/index.htm 6. http://nbuv.gov.ua/ 7. http://www.sciencedirect.com/ 8. https://www.scopus.com/ 9. http://webofknowledge.com/ 10. https://www.researchgate.net/ 11. https://mon.gov.ua
Тривалість курсу	102 год. один семестр
Обсяг курсу	52 годин аудиторних занять. З них 26 годин лекцій, 26 годин лабораторних робіт/практичних занять та 50 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент буде :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Знати -загальні закономірності кінетики перебігу хімічних процесів та їх представлення системою кінетичних диференціальних рівнянь -методи одержання детермінованих моделей та дослідження хімічних та хіміко-технологічних процесів -статистичні показники та критерії для аналізу хімічних процесів -класифікацію і методи одержання статистичних моделей процесів -використання моделей для дослідження та оптимізації процесів -використання рядів Фурє для апроксимації та прогнозування часових рядів. - Вміти - на основі наведеної схеми хімічної реакції скласти систему кінетичних диференціальних рівнянь та одержувати їх розв'язок з допомогою різницевого рівнянь -здійснити вибір вихідних та вхідних параметрів для побудови статистичних моделей -одержувати моделі методами кореляційного, регресивного та факторного аналізу -здійснювати статистичну перевірку одержаних моделей з результатами експериментальних вимірів -використовувати метод планованого експерименту в хімічних дослідженнях -проводити оптимізацію процесів аналітичними та градієнтними

методами

-одержувати динамічні моделі та застосовувати їх для прогнозування часових рядів

-застосовувати матричні операції для побудови моделей

-застосовувати програмні редактори Q-BASIC, EXCEL, VISUAL BASIC для моделювання процесів.

У результаті успішного вивчення курсу студент набуває **загальних компетентностей:**

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу на основі логічних аргументів та перевірених фактів.

ЗК 2. Здатність вчитися впродовж життя і оволодіювати сучасними знаннями..

ЗК 3. Гнучкість мислення.

ЗК 7. Здатність здійснювати математичні розрахунки, оцінку та аналіз помилок, правильно використовувати одиниці та представлення даних.

ЗК 8. Навики у області застосування інформаційно комунікаційних технологій для обробки хімічних даних.

ЗК 14. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел;

та спеціальних (фахових) компетентностей:

СК1. Розуміння ключових хімічних понять, основних фактів, концепцій, принципів і теорій, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, для можливості у подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.

СК 5. Навики у практичному застосуванні теоретичних відомостей.

СК6. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та модулювання в хімії. СК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

СК11. Здатність до опанування нових областей шляхом самостійного навчання.

Програмні результати навчання:

-ПР3 1 Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних наук

-ПР3 2 Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні достатньому для використання у різних сферах хімії.

- ПР35 Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин.

- ПР37 Знати основні принципи квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будова атома, молекул та хімічного зв'язку..

ПРК4 Здатність до інтерпретації своїх результатів.

ПРУ3 Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунку, відображення та моделювання хімічних систем та процесів. обробки експериментальних даних.

ПРУ4. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне спеціальне програмне

	забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.																					
Ключові слова	Математичне моделювання, оптимізація, розрахунки, побудова моделей																					
Формат курсу	Очний																					
	Проведення лекцій, лабораторних робіт, розрахункові роботи та консультації для кращого розуміння тем																					
Теми	<p style="text-align: center;">ТЕМИ ЛЕКЦІЙНОГО КУРСУ</p> <p>1.Зміст та завдання даного курсу. Основні поняття та визначення. Класифікація моделей.</p> <p>2. Основні показники процесів. Особливості одержання та застосування моделей.</p> <p>3.Детерміновані моделі хімічних процесів. Складання системи кінетичних диференціальних рівнянь на основі наведеної схеми хімічної реакції.</p> <p>4.Статистичні моделі. Методи кореляційного та регресійного аналізу.</p> <p>5. Матричне представлення регресійних моделей.</p> <p>6.Метод факторного аналізу. Перехід до безрозмірних координат. Матриці планування повного факторного експерименту. Одержання лінійних моделей.</p> <p>7. Одержання нелінійних моделей.</p> <p>8. Особливості планування експерименту для одержання моделей другого порядку.</p> <p>9. Загальна задача оптимізації процесів. Вимоги до вибору параметра оптимізації. Цільові функції.</p> <p>10. Аналітичні методи оптимізації. Метод множників Лагранжа. Лінійне та динамічне програмування. Принцип максимуму . Принцип максимуму Понтрягіна.</p> <p>11. Градієнтні методи оптимізації. Симплекс-метод. Метод крутого сходження по поверхні відклику.</p> <p>12. Динамічні моделі. Методи згладжування, апроксимац та прогнозування часових рядів.</p> <p>13.Побудова динамічних моделей та багатофакторне прогнозування. Гармонічний аналіз.</p>																					
Підсумковий контроль, форма	<p>залік в кінці семестру письмовий, комбінований Оцінювання підготовленості студентів.</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th rowspan="2">№ з/п</th> <th rowspan="2">Види розрахункових робіт</th> <th colspan="3">Оцінювання підготовленості студентів</th> </tr> <tr> <th>Зміст лабораторних</th> <th>Форма звітності</th> <th>Сума балів</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">1</td> <td>Прості кінетичні моделі</td> <td>Диференціальні рівняння. Розрахунок констант</td> <td>Звіт за роботу</td> <td style="text-align: center;">10</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">2</td> <td>Складні кінетичні моделі</td> <td>Системи диференціальних рівнянь Розрахунок параметрів реакції</td> <td>Звіт за роботу</td> <td style="text-align: center;">10</td> </tr> </tbody> </table>				№ з/п	Види розрахункових робіт	Оцінювання підготовленості студентів			Зміст лабораторних	Форма звітності	Сума балів	1	Прості кінетичні моделі	Диференціальні рівняння. Розрахунок констант	Звіт за роботу	10	2	Складні кінетичні моделі	Системи диференціальних рівнянь Розрахунок параметрів реакції	Звіт за роботу	10
№ з/п	Види розрахункових робіт	Оцінювання підготовленості студентів																				
		Зміст лабораторних	Форма звітності	Сума балів																		
1	Прості кінетичні моделі	Диференціальні рівняння. Розрахунок констант	Звіт за роботу	10																		
2	Складні кінетичні моделі	Системи диференціальних рівнянь Розрахунок параметрів реакції	Звіт за роботу	10																		

	3	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.	Пошук моделей, які описують процеси	Звіт за роботу	10
	4	Розрахунок процесу осадження твердих частинок в різних середовищах	Модель досліджуваного процесу	Звіт за роботу	10
	5	Робота з програмою MathCAD	Опис можливостей програми	Звіт за роботу	10
	6	Ймовірсні моделі	Побудова моделей та оцінка їхньої надійності	Звіт за роботу	10
	7.	Кореляційні рівняння	Одержання кореляційних рівнів	Звіт за роботу	10
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з математики, хімічної технології, інформатики, фізики, фізичної хімії, дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату з курсу «Математичні методи моделювання та оптимізації в хімії», та розуміння літературних джерел.				
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, практичні роботи, розрахункові роботи обговорення отриманих результатів у навчальних спільнотах і т. д.) проектно-орієнтоване навчання, дискусія				
Необхідне обладнання	Із урахуванням особливостей навчальної дисципліни, вивчення курсу може потребувати використання програмного забезпечення, крім загально вживаних програм і операційних систем необхідні програми Q-BASIC, EXCEL, VISUAL BASIC, MathCAD.				
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • практичні/самостійні тощо : 70% семестрової оцінки; максимальна кількість балів_70__ • контрольні заміри (модулі): 10% семестрової оцінки; максимальна кількість балів_10__ • іспит/залік: 20% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів_20__ <p>Підсумкова максимальна кількість балів_100_____</p> <p>Письмові роботи: Очікується, що студенти виконають декілька видів письмових робіт (есе, вирішення кейсу). Академічна доброчесність: Очікується, що роботи студентів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикавання джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її</p>				

	<p>незарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання усіх видів письмових робіт, передбачених курсом. Література. Уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p>Політика виставлення балів. Враховуються бали набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час практичного заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвочасне виконання поставленого завдання і т. ін. Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання до заліку чи екзамену.</p>	<p>Наводиться перелік питань та завдань для проведення підсумкової оцінки знань. Також можна надати посилання на веб-сторінку де розміщені вказані матеріали.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Основні поняття та визначення курсу математичне моделювання.. Класифікація моделей. 2. Основні показники процесів. Особливості одержання та застосування моделей. Застосування моделей. 3. Детерміновані моделі хімічних процесів. Складання системи кінетичних диференціальних рівнянь на основі наведеної схеми хімічної реакції. Методи перевірки адекватності моделей. 4. Статистичні моделі. Методи кореляційного та регресійного аналізу. Багато параметрові кореляційні рівняння. 5. Матричне представлення регресійних моделей. Особливості розрахунку таких моделей. 6. Метод факторного аналізу. Перехід до безрозмірних координат. Матриці планування повного факторного експерименту. Одержання лінійних моделей. Перевірка адекватності вказаних моделей. 6. Особливості програми MathCAD. 7. Динамічні моделі. Методи згладжування, апроксимації та прогнозування часових рядів. Застосування вказаних моделей. 8. Побудова динамічних моделей та багатофакторне прогнозування. Кореляційні рівняння. 9. Гармонічний аналіз. 10. Розрахунок процесу осадження твердих частинок в різних середовищах. 11. Аналіз простих моделей. 12. Побудова диференціальних рівнянь для складних моделей. 13. Метод найменших квадратів 14. Пошук рівнянь, які описують залежності розчинності солей від температури. 15. Критерій Стьюдента. 16. Критерій Фішера.

Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.
-------------------	--------------------------------------------------------------------------------

***ПРИМІТКА**

Зовнішня форма вираження силябусу може бути відмінною та поданою до візуального сприйняття не лише у формі таблиці. Бажаним є дотримання самої структури. Можливе наповнення силябусу додатковими розділами із розширенням інформації про курс. Запропонована форма є лише зразком.

*** Схема курсу*

Тиж. / дата / год.-	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності (заняття)* *лекція, самостійна, дискусія, групова робота)	Література.*** Ресурси в інтернеті	Завдання, год	Термін виконання
1	Зміст та завдання даного курсу. Основні поняття та визначення. Класифікація моделей.	Лекція Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова простих моделей. семінар	1 тиждень
2	Основні показники процесів. Особливості одержання та застосування моделей.	Лекція Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова простіх моделей. Семінар	
3	Детерміновані моделі хімічних процесів. Складання системи кінетичних диференціальних рівнянь на основі наведеної схеми хімічної реакції.	Лекція Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова складних моделей. Семінар	1 тиждень
4	Статистичні моделі. Методи кореляційного та регресійного аналізу.	Лекція. Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова складних кінетичних моделей	
5	Матричне представлення регресійних моделей.	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудов складних кінетичних моделей	1 тиждень

6	Метод факторного аналізу. Перехід до безрозмірних координат. Матриці планування повного факторного експерименту. Одержання лінійних моделей.	Лекція. Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова кінетичних моделей. Семінар	1 тиждень
7	.Одержання нелінійних моделей.	Лекція. Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова нелінійних моделей. Семінар	1 тиждень
8	Особливості планування експерименту для одержання моделей другого порядку.	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Планування експерименту, побудова моделей. Семінар	1 тиждень
9	Загальна задача оптимізації процесів. Вимоги до вибору параметра оптимізації. Цільові функції.	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Знаходження функцій, які описують процес. Семінар	1 тиждень
10	Аналітичні методи оптимізації. Метод множників Лагранжа. Лінійне та динамічне програмування. Принцип максимуму . Принцип максимуму Понтрягіна.	Лекція. Розрахункова робота	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Побудова складних фізичних моделей. Семінар	1 тиждень
11	Гradientні методи оптимізації. Симплекс-метод. Метод крутого	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Ймовірнісні моделі. Семінар	1 тиждень

	сходження по поверхні відклику.				
12	Динамічні моделі. Методи згладжування, апроксимація та прогнозування часових рядів.	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Знаходження кореляційних моделей. Семінар	1 тиждень
13	Побудова динамічних моделей та багатофакторне прогнозування. Гармонічний аналіз.	Лекція. Розрахункова робота.	Рекомендована література з списку поз. [1 -6]	Кореляційні моделі. Семінар	1 тиждень